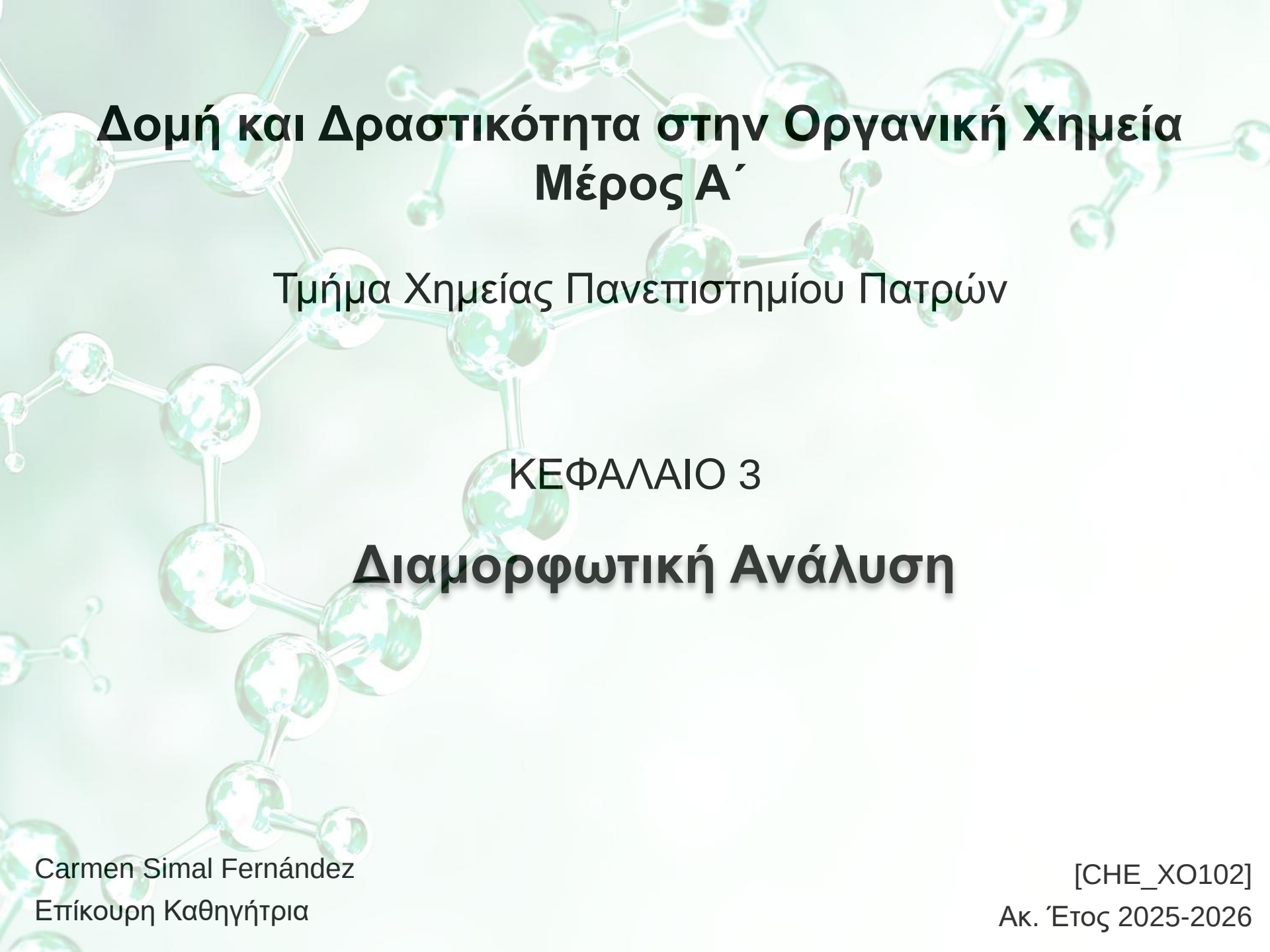


A faint, light green molecular structure, possibly a polymer chain or a network of atoms, is visible in the background. It consists of spheres (atoms) connected by lines (bonds).

Δομή και Δραστικότητα στην Οργανική Χημεία

Μέρος Α΄

Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Διαμορφωτική Ανάλυση

Διαμορφωτική Ανάλυση

- ♦ Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων
- ♦ Προβολή κατά Newman
- ♦ Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας
- ♦ Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Κυκλοεξάνιο. Διαμορφώσεις ανακλίντρου

Αξονικοί και ισημερινοί δεσμοί

Αναστροφή δακτυλίου

Διαμορφώσεις μονοϋποκατεστημένων κυκλοεξανίων

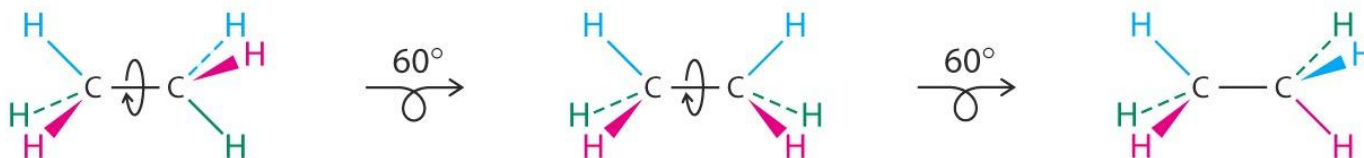
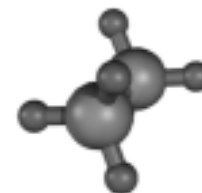
Διαμορφώσεις *cis/trans*-1,2-διυποκατεστημένων κυκλοεξανίων

Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

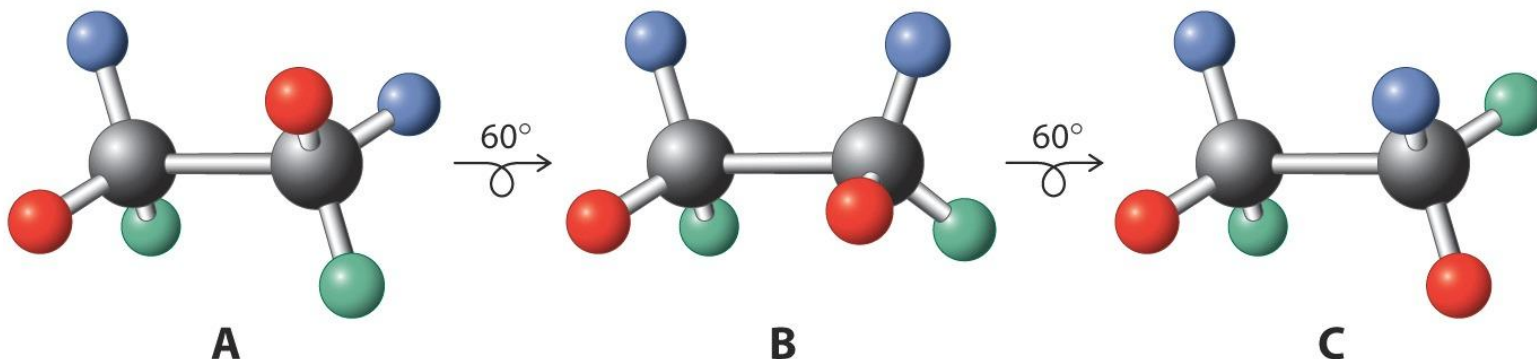
Διαμορφώσεις: Είναι οι πιθανές διατάξεις που μπορούν να υιοθετήσουν τα μόρια στο τριδιάστατο χώρο.

Διαμορφωμερή (ή Στροφομερή)

Λόγω κυλινδρικής συμμετρίας του σ δεσμού (μετωπική επικάλυψη των τροχιακών), η περιστροφή γύρω από τους δεσμούς C-C είναι ελεύθερη στα αλκάνια. Επομένως, μπορούν να υιοθετήσουν **άπειρες διαμορφώσεις στον χώρο**.

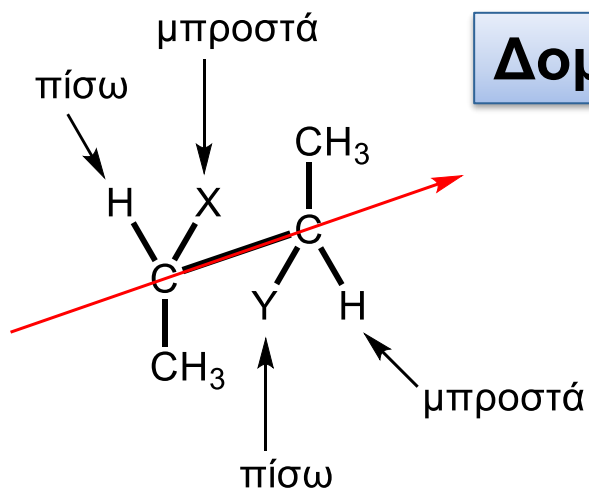


(αλληλομετατρέπονται συνεχόμενα σε θερμοκρασία δωματίου)

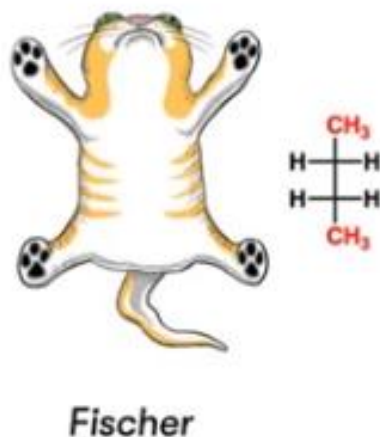
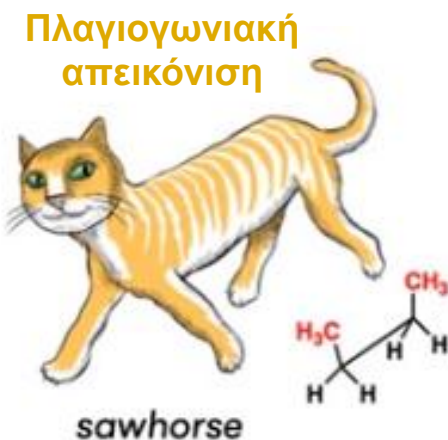


Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

Δομές - Σχεδιασμός



Πλαγιογωνιακή δομή

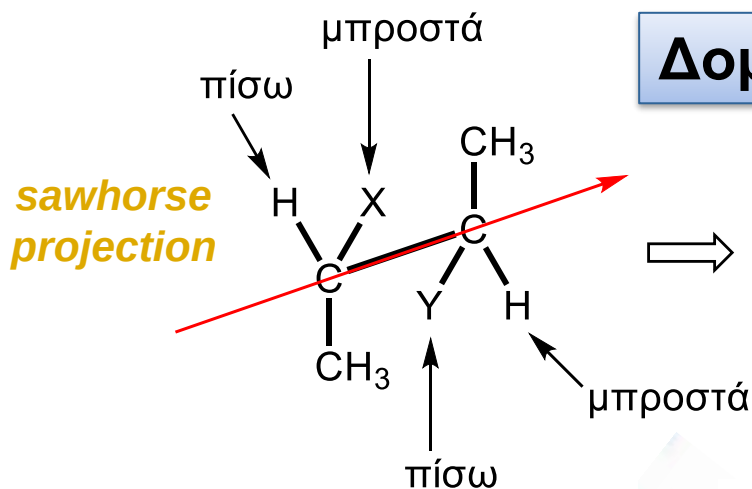


@MasterOrganicChemistry

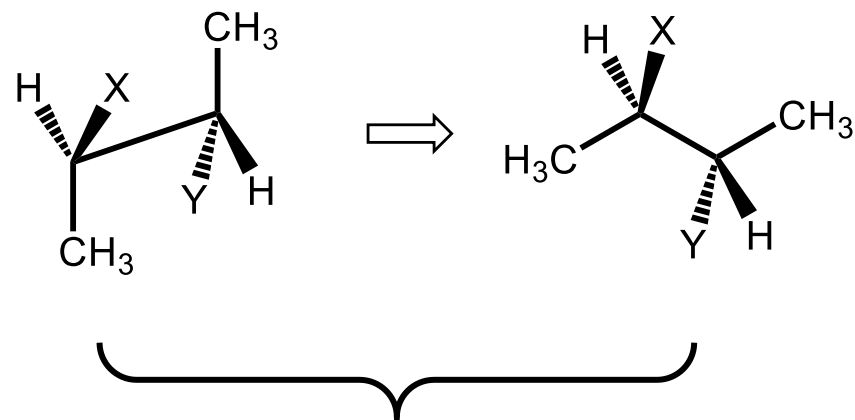
✓ Μία προβολή είναι μία αναπαράσταση του μορίου σε τριδιάστατο χώρο.

Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

Δομές - Σχεδιασμός



Πλαγιογωνιακή δομή



wedge-and-dash projection

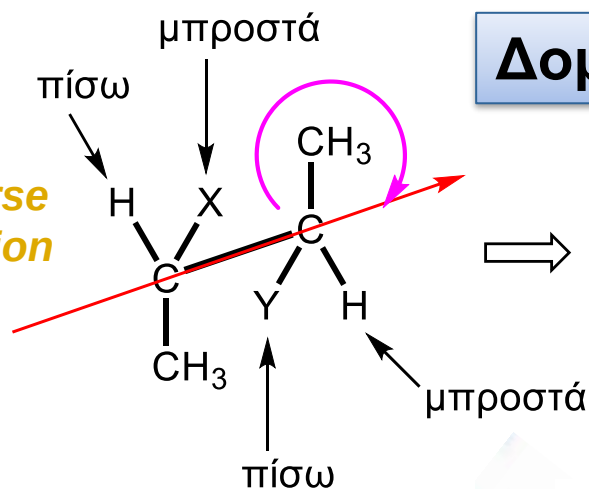
Προοπτική απεικόνιση -
Στεreoχημική δομή

➤ Σφηνοειδείς,
κανονικές
και διακεκομμένες
γραμμές ...

Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

Δομές - Σχεδιασμός

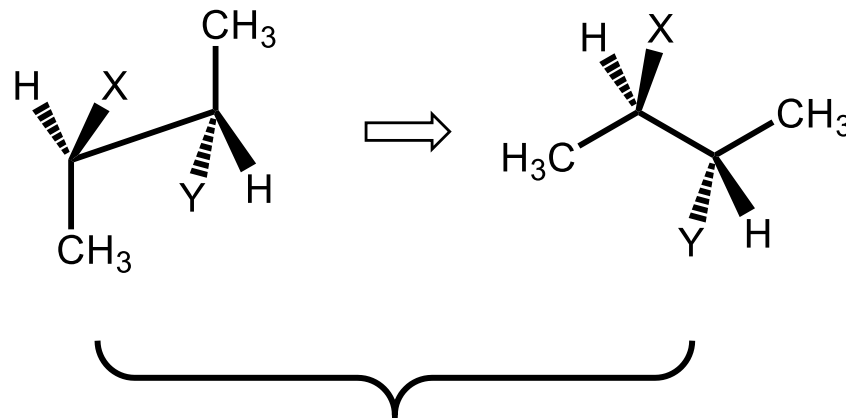
sawhorse projection



Πλαγιογωνιακή δομή

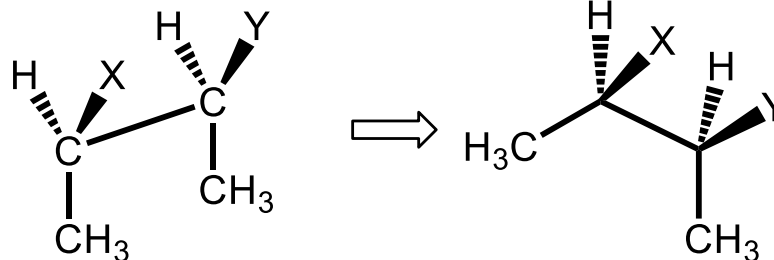
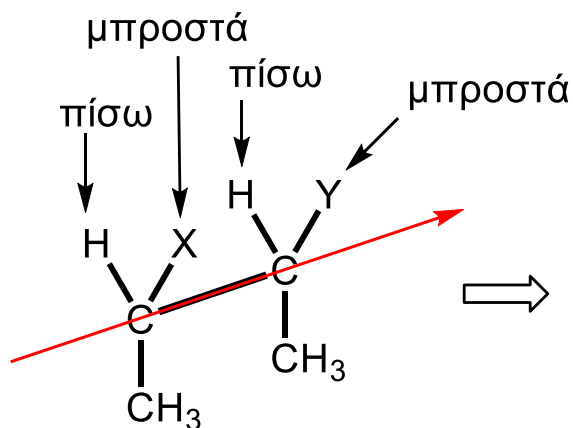


wedge-and-dash projection



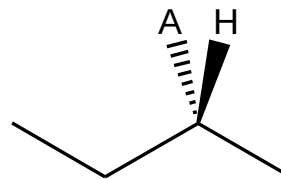
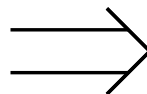
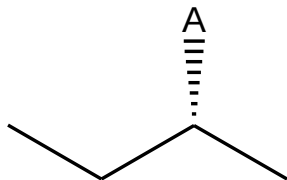
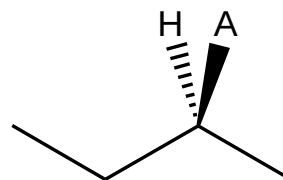
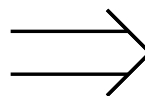
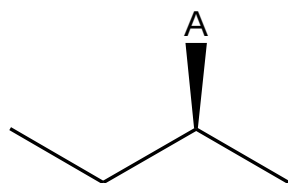
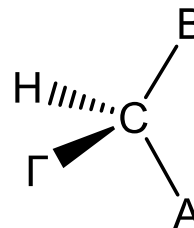
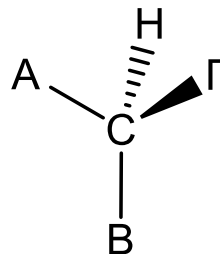
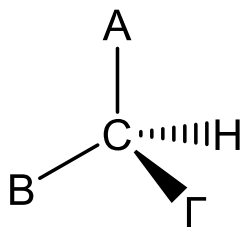
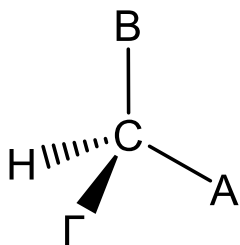
Προοπτική απεικόνιση -
Στερεοχημική δομή

➤ Σφηνοειδείς,
κανονικές
και διακεκομμένες
γραμμές ...



Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

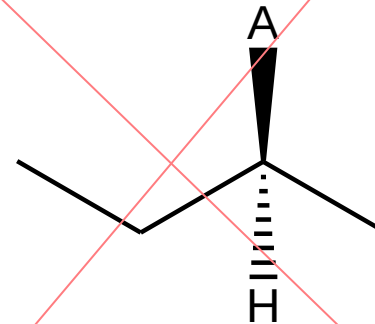
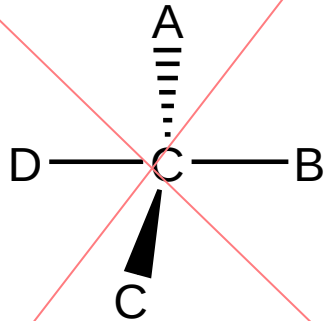
Παραδείγματα σωστού σχεδιασμού στεreoχημικών δομών



Σφηνοειδείς, κανονικές και διακεκομμένες γραμμές με γωνία δεσμού 109.5° (sp^3).

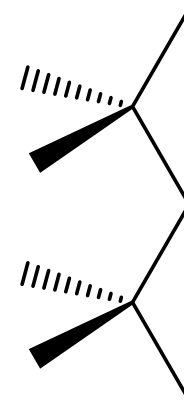
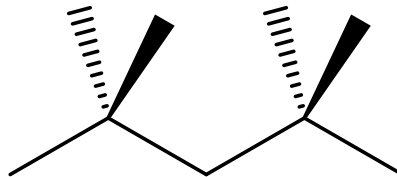
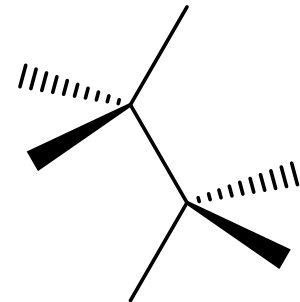
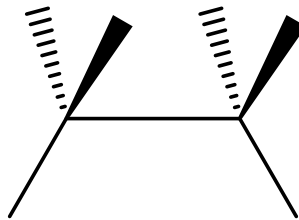
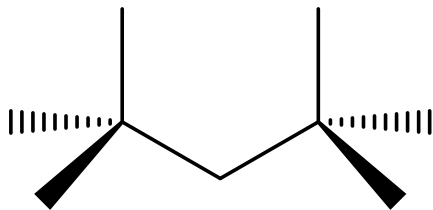
Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

ΛΑΝΘΑΣΜΕΝΟΣ σχεδιασμός στεreoχημικών δομών



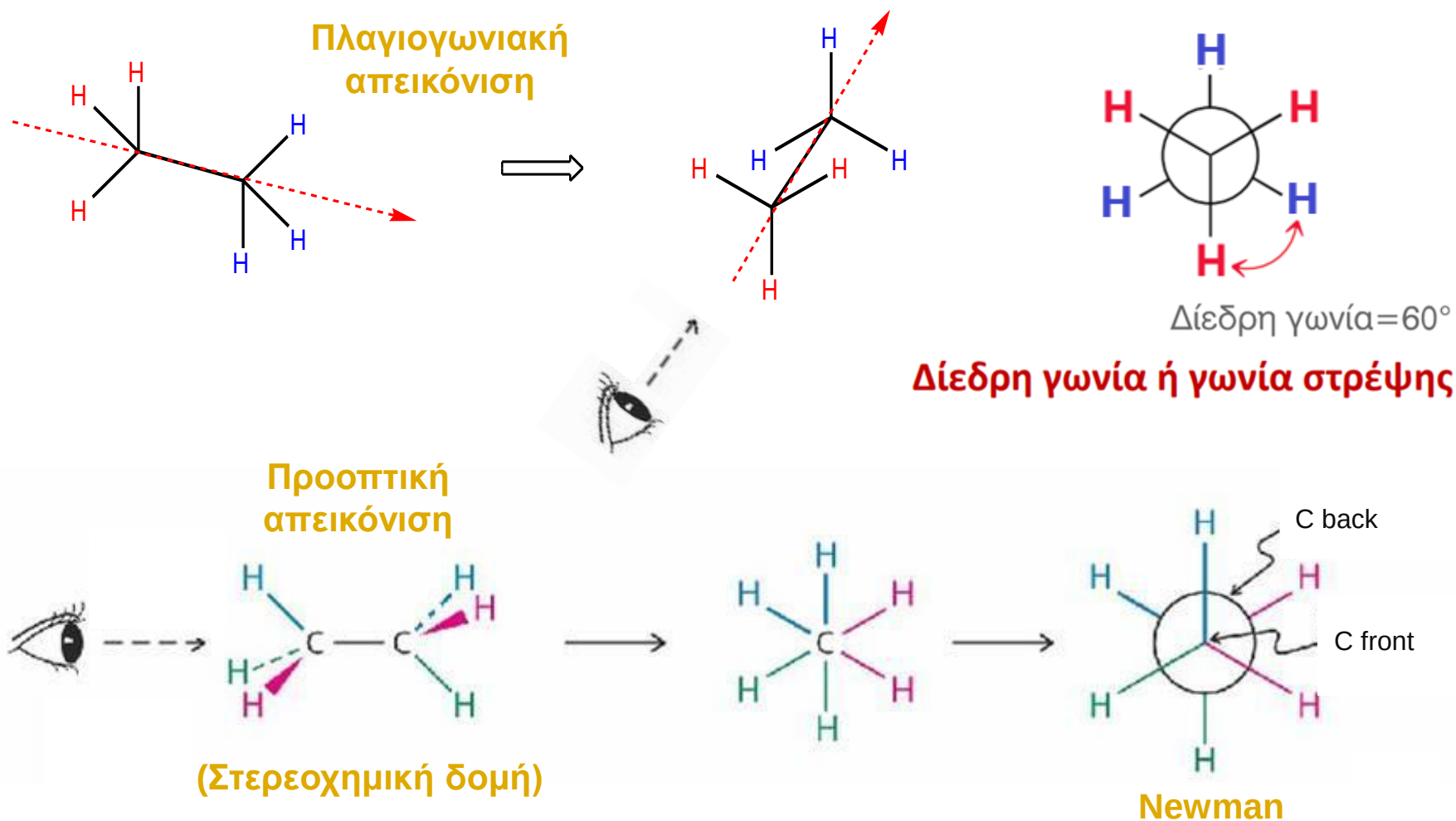
Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

ΣΩΣΤΟΣ σχεδιασμός στεreoχημικών δομών

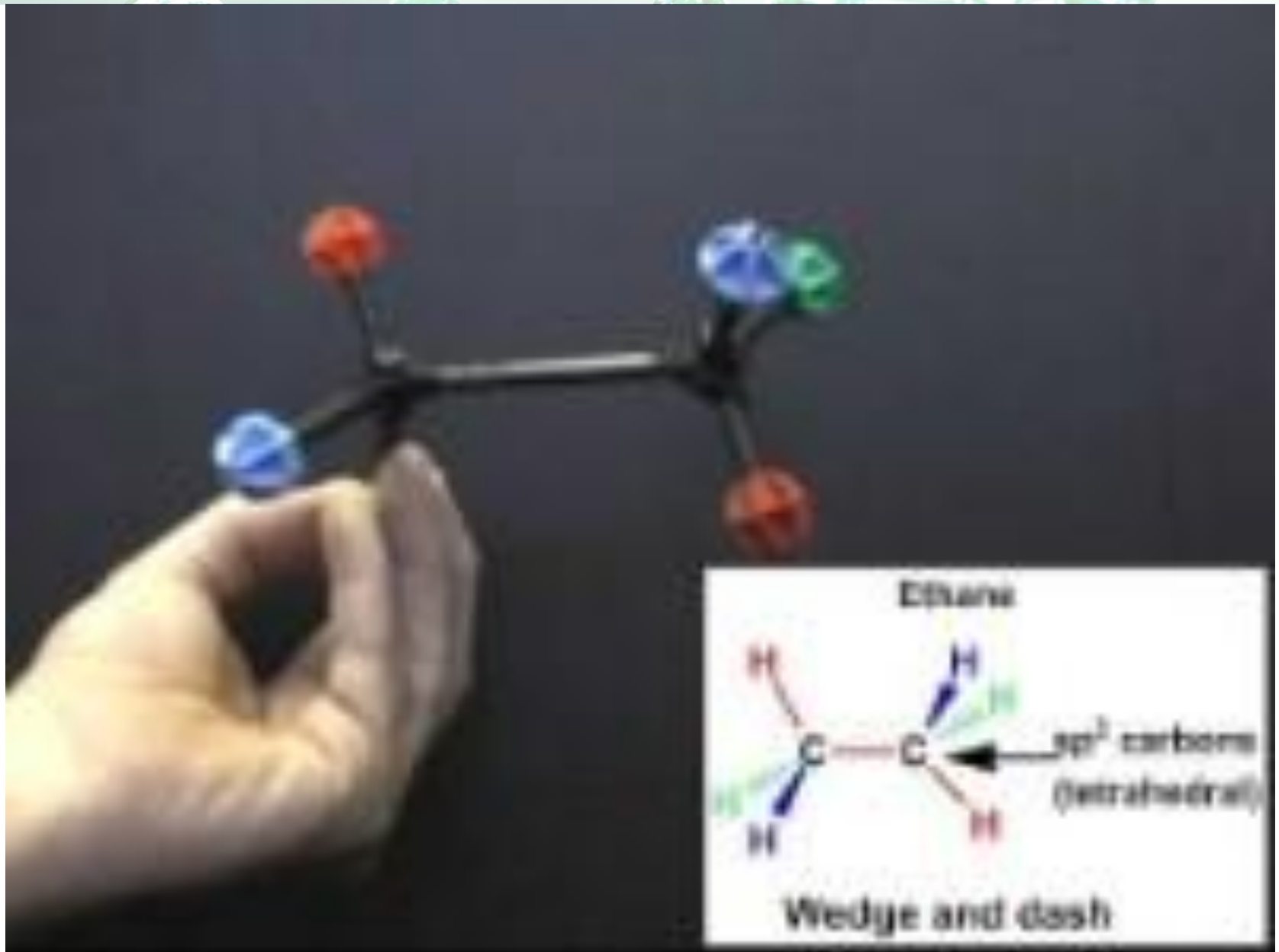


Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

Η **προβολή κατά Newman** σχεδιάζεται βλέποντας το μόριο κατά μήκος του άξονα που συνδέει τα δύο άτομα C. Το μπροστινό σχεδιάζεται σαν κουκκίδα και το πίσω σαν κύκλος.

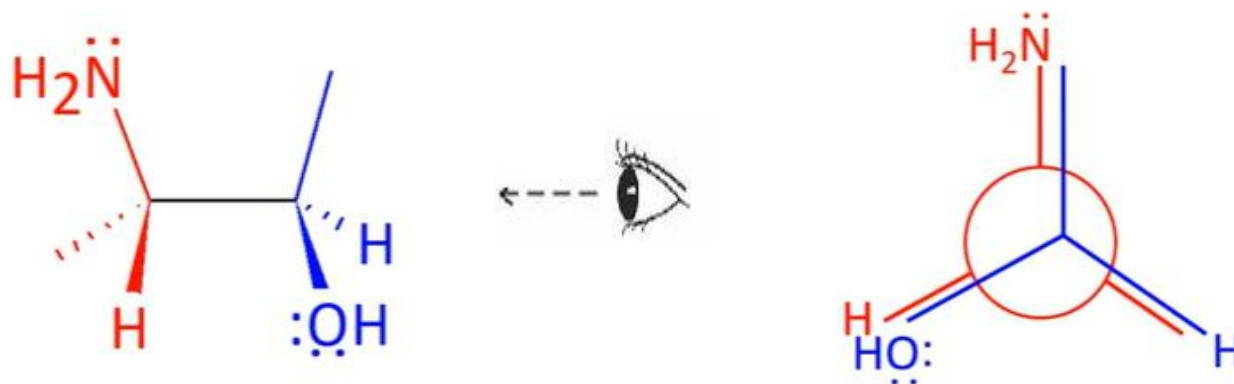
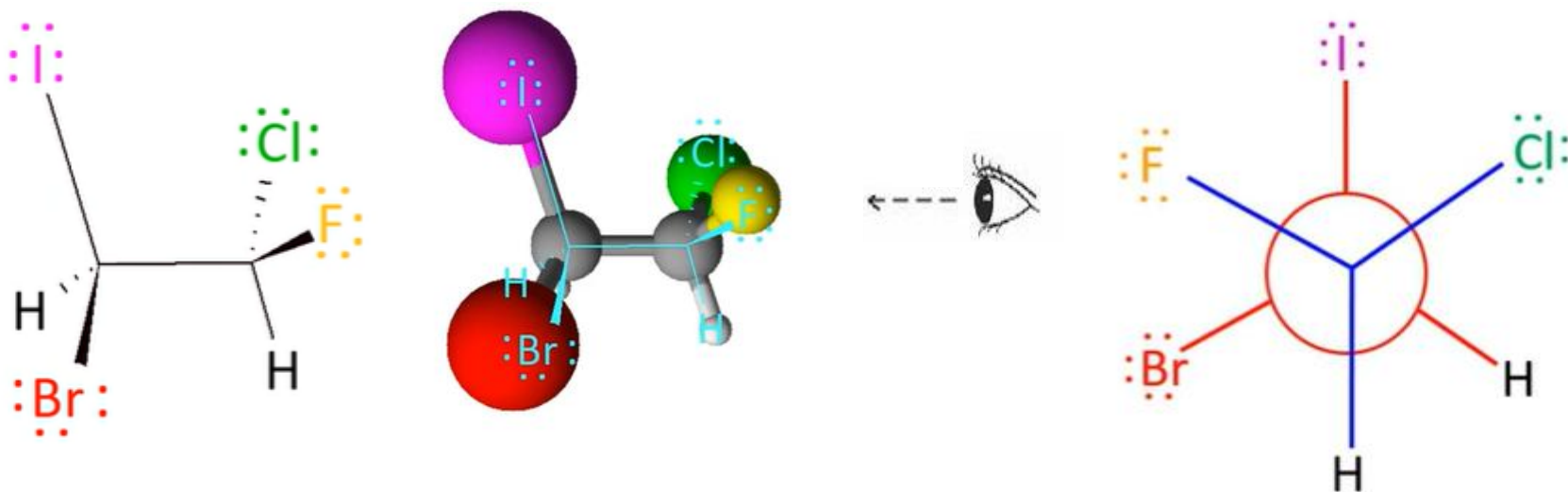


Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων



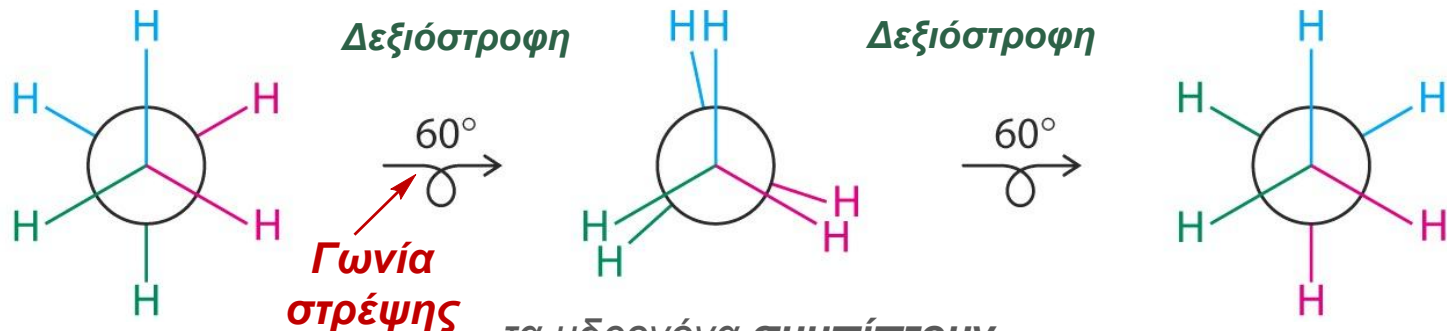
Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

Η **προβολή κατά Newman** σχεδιάζεται βλέποντας το μόριο κατά μήκος του άξονα που συνδέει τα δύο άτομα C. Το μπροστινό σχεδιάζεται σαν κουκκίδα και το πίσω σαν κύκλος.



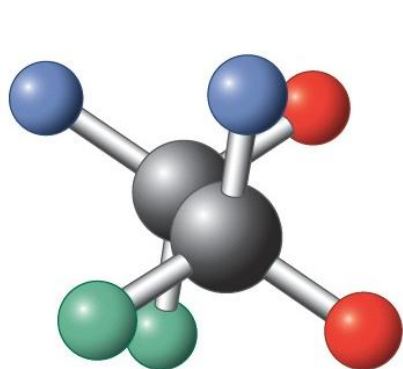
Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

Τα διαμορφωμερή αλληλομετατρέπονται ταχύτατα και η απομόνωση τους είναι δυνατή πολύ σπάνια. Η αναπαράσταση τους γίνεται εύκολα με **προβολές κατά Newman**.

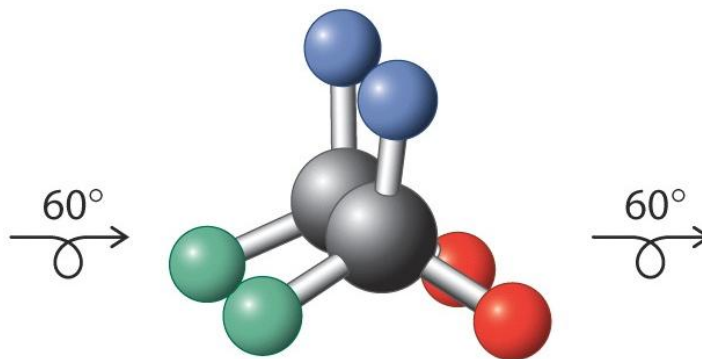


κάθε υδρογόνο βρίσκεται στη διχοτόμο των άλλων δύο

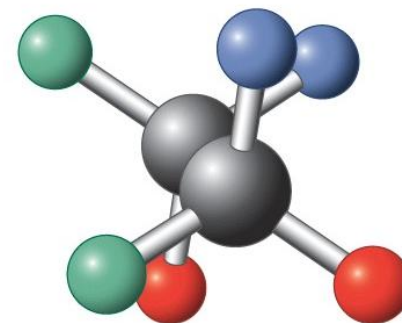
τα υδρογόνα συμπίπτουν
(απωστικές αλληλεπιδράσεις
δεσμικών σ e-)



Staggered
Διαβαθμισμένη



Eclipsed
Εκλειπτική



Staggered
Διαβαθμισμένη

Διαμορφώσεις αιθανίου

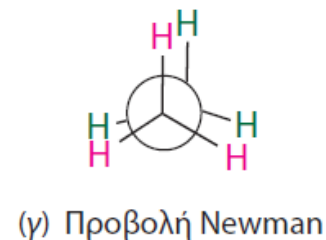
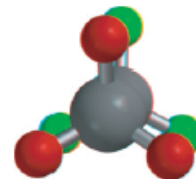
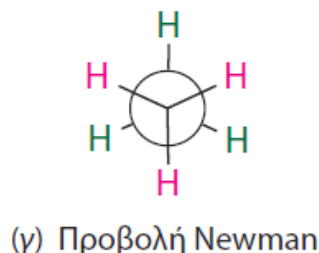
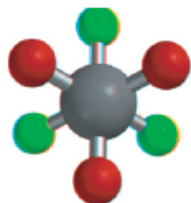
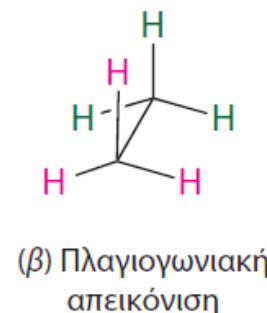
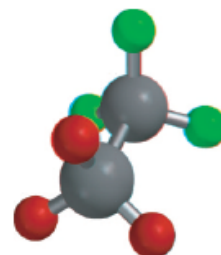
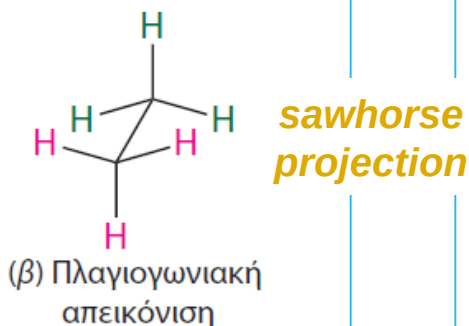
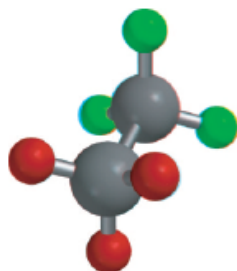
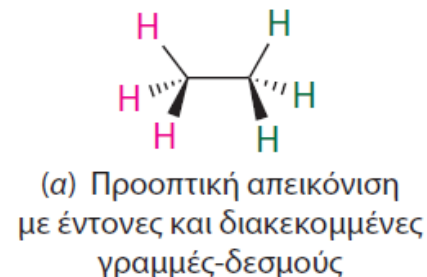
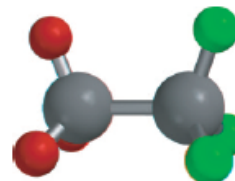
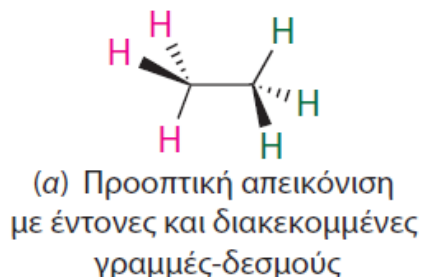
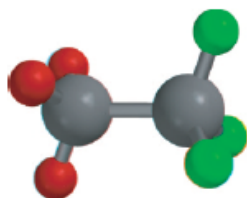
Δομή και διαμορφώσεις αλκανίων

Τα διαμορφωμερή αλληλομετατρέπονται ταχύτατα και η απομόνωση τους είναι δυνατή πολύ σπάνια. Η αναπαράσταση τους γίνεται εύκολα με **προβολές κατά Newman**.

Διαβαθμισμένη

*wedge-and-dash
projection*

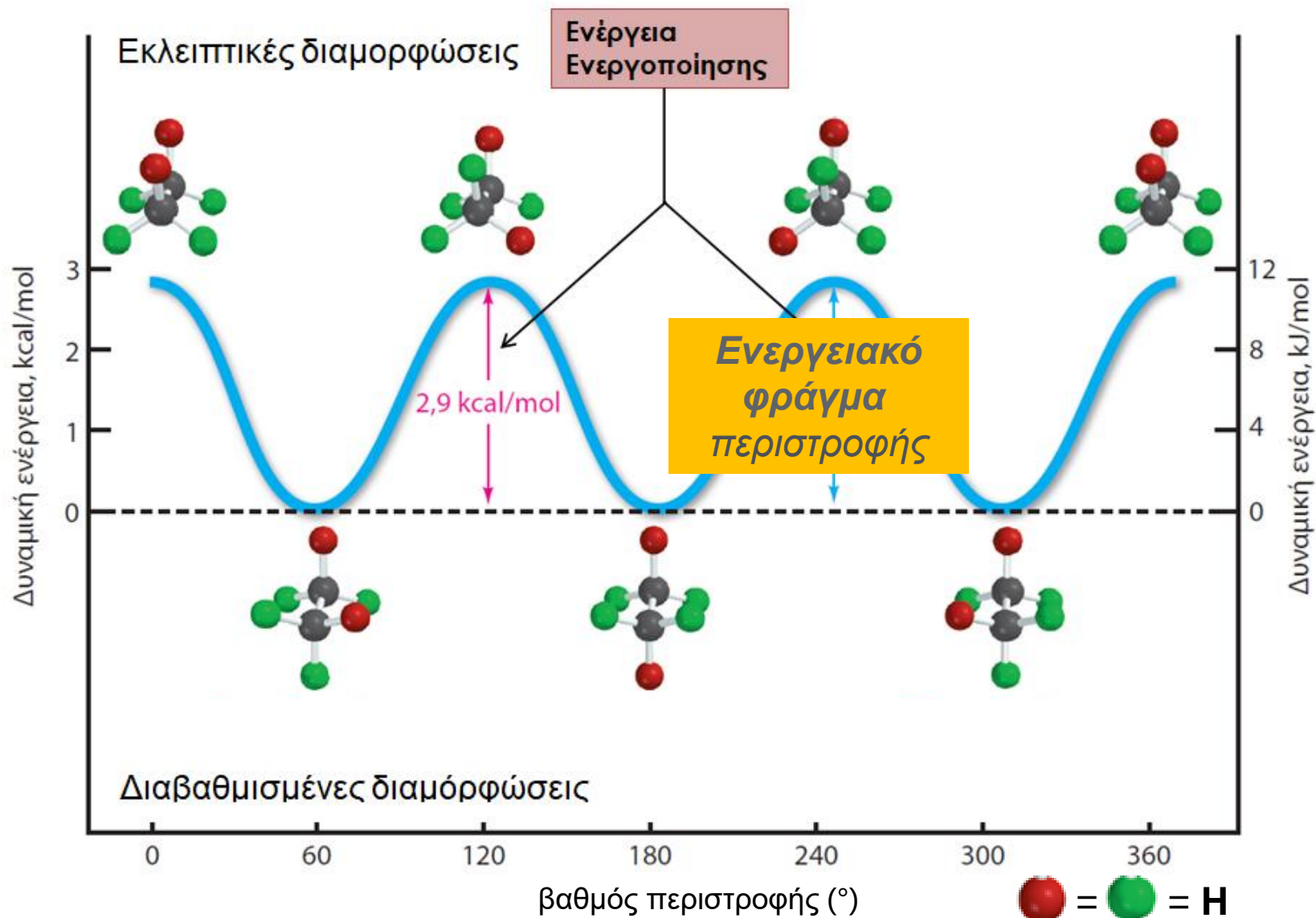
Εκλειπτική



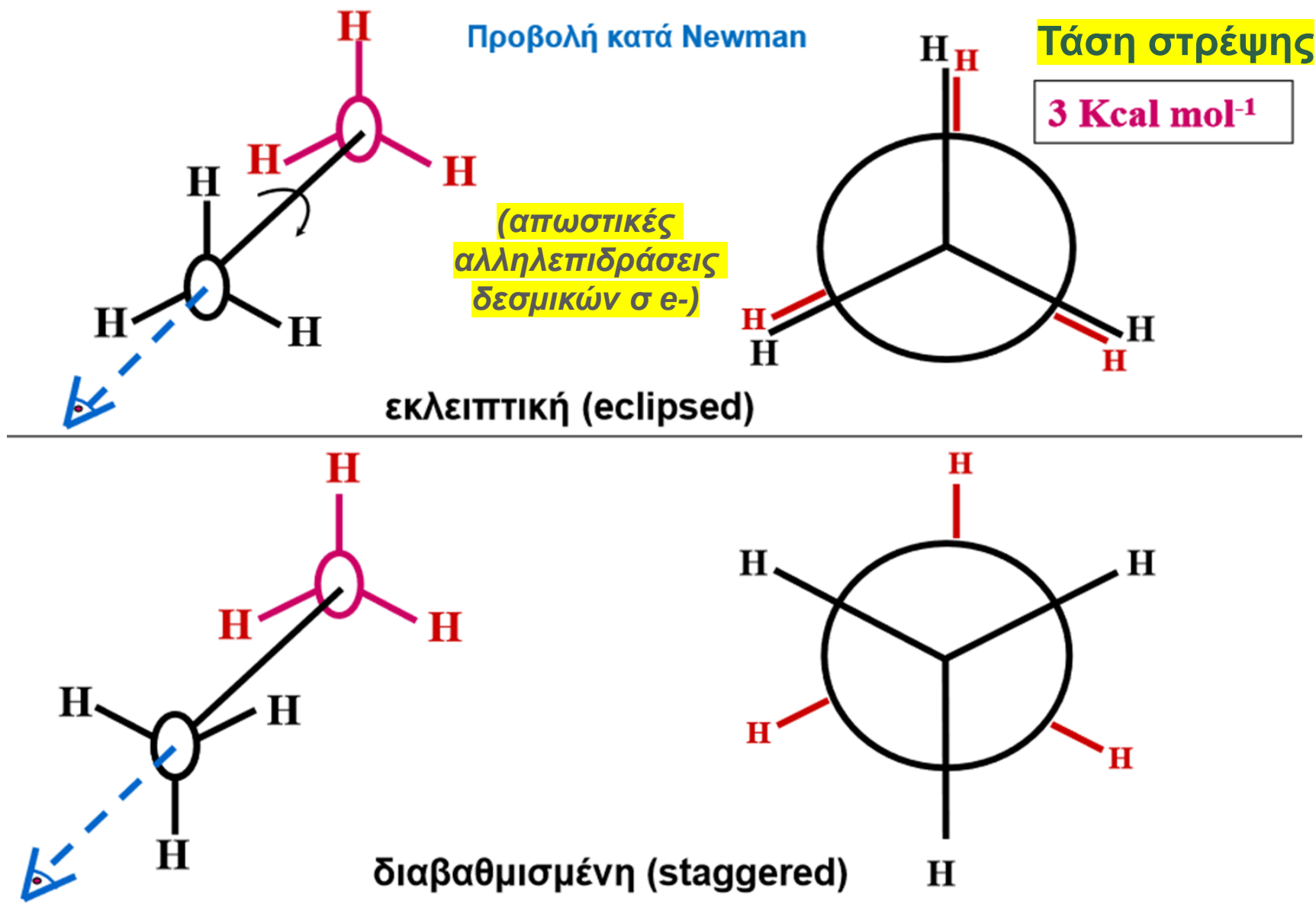
Διαμορφώσεις αιθανίου

Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

Ενεργειακό διάγραμμα διαμορφώσεων αιθανίου



Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας



Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

Η σταθερότητα των διαμορφώσεων εξαρτάται από τις τάσεις που αναπτύσσονται.

Τάση: Θεωρείται κάθε αποσταθεροποιητική αλληλεπίδραση μεταξύ δεσμικών ή αδεσμικών ηλεκτρονίων ενός μορίου που αυξάνει τη δυναμική του ενέργεια.

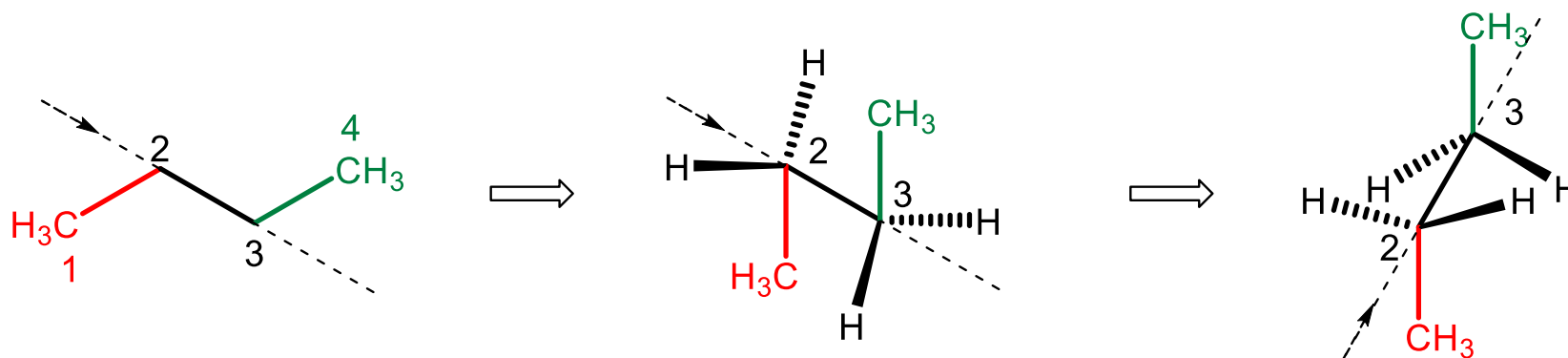
Είδη Τάσεων:

- **Στρέψης** Είναι η απωστική αλληλεπίδραση δύο σ δεσμών σε εκλειπτική διαμόρφωση (λόγω της απωστικής αλληλεπίδρασης των δεσμικών ηλεκτρονίων όταν το μόριο περιστρέφεται γύρω από έναν δεσμό, είναι η «αντίσταση σε αυτή την περιστροφή»).
- **Στερεοχημική** Σχετίζεται με τις απωστικές αλληλεπιδράσεις που υφίστανται, όταν δύο ομάδες προσεγγίζονται σε μικρή απόσταση.
- **Γωνιακή** (Εμφανίζεται στα κυκλοαλκάνια) Σχετίζεται με την άμβλυνση ή μείωση της γωνίας C-C-C πέραν της ιδανικής τιμής των 109.5° (sp^3).

Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

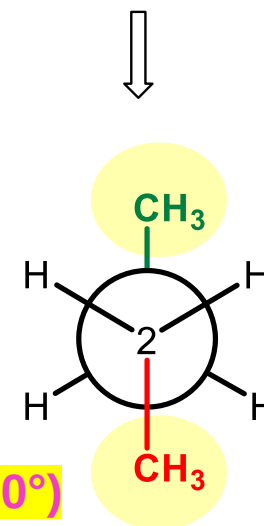
Ανάλυση διαμορφώσεων βουτανίου

Σχεδιασμός προβολής κατά Newman του βουτανίου



Θεωρούμε ότι τα δύο άτομα C (C2, C3) βρίσκονται στο κέντρο του κύκλου. Οι δεσμοί του εμπρόσθιου ατόμου C (C2) αρχίζουν από το κέντρο του κύκλου, ενώ οι δεσμοί του οπίσθιου ατόμου C (C3) εξέρχονται από τον κύκλο.

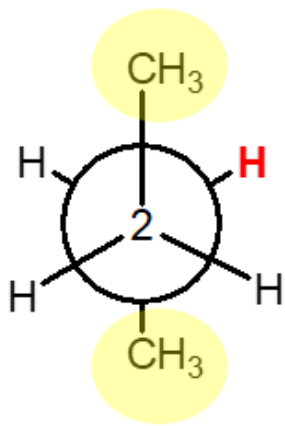
Διαβαθμισμένη-**ANTI (180°)**



Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

Ανάλυση διαμορφώσεων βουτανίου

Σταθερότερο
Διαμορφωμερές

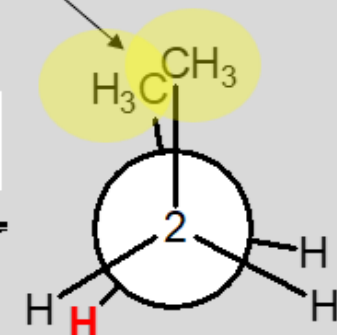
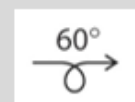
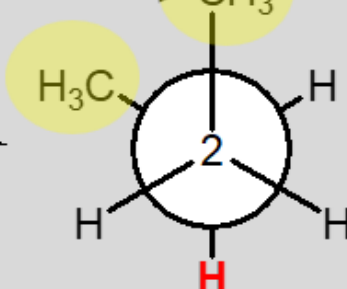
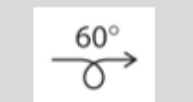
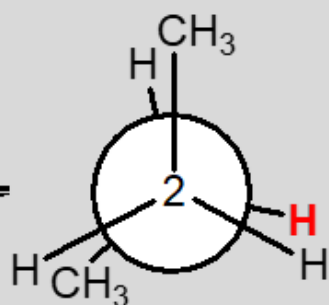


Διαμόρφωση **ANTI**
(180°):

Διαβαθμισμένη

H σταθερότερη
διαμόρφωση

Δεν εμφανίζει τάση



μεγ. ενέργειας

Εκλειπτική
διαμόρφωση:

Τάση στρέψης μεταξύ
δύο αλληλεπιδράσεων
CH₃-H και μίας H-H

Διαμόρφωση **(60°)**
GAUCHE
(συγκλινής):

Διαβαθμισμένη
Στερεοχημική τάση
μεταξύ CH₃-CH₃

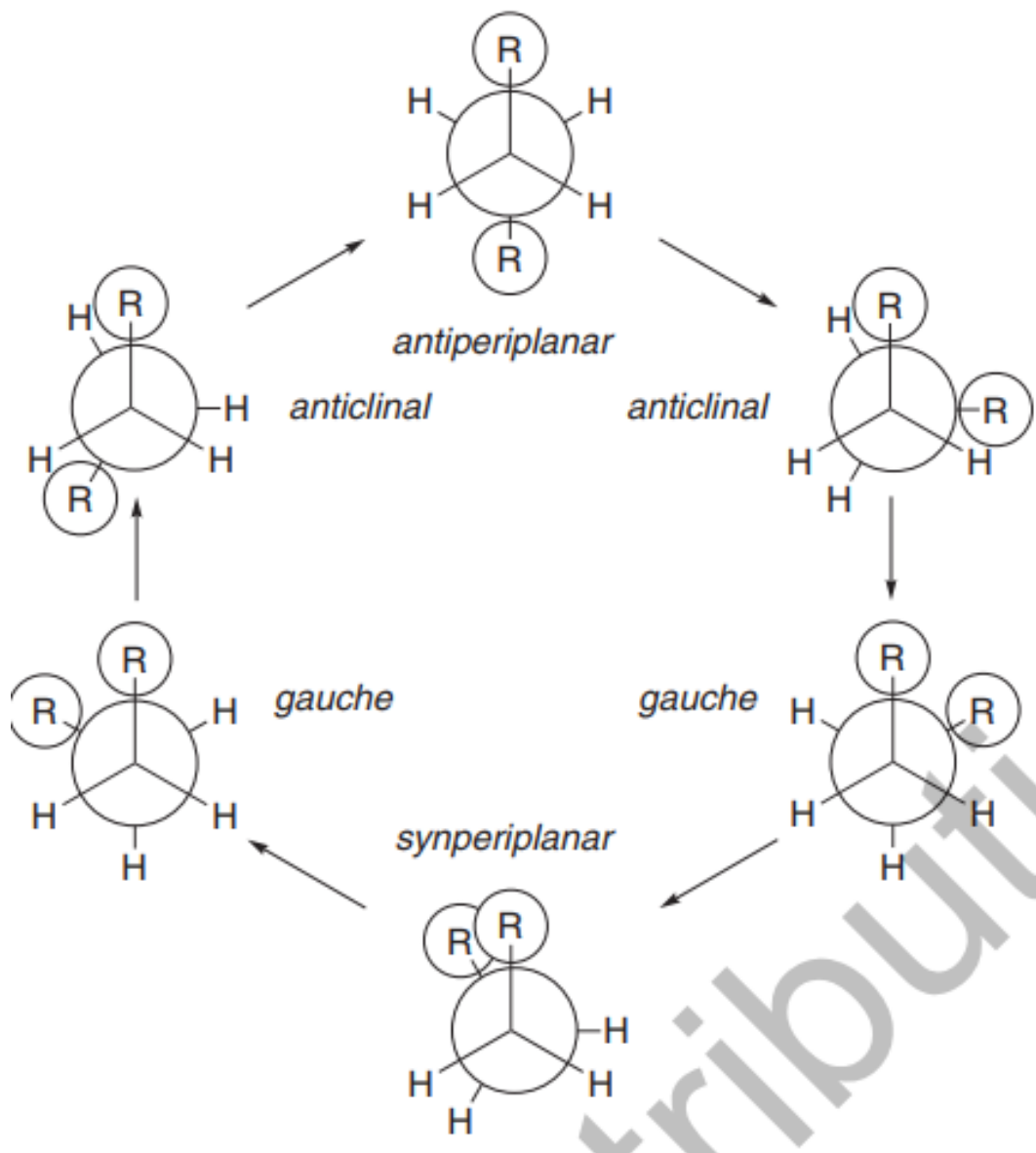
(‘ολικά’) Εκλειπτική
διαμόρφωση:

Στερεοχημική τάση
μεταξύ εκλειπτικών
CH₃-CH₃ και τάση
στρέψης μεταξύ δύο
αλληλεπιδράσεων H-
H και μίας CH₃-CH₃

«εκλειπτική
μέγιστης ενέργειας»

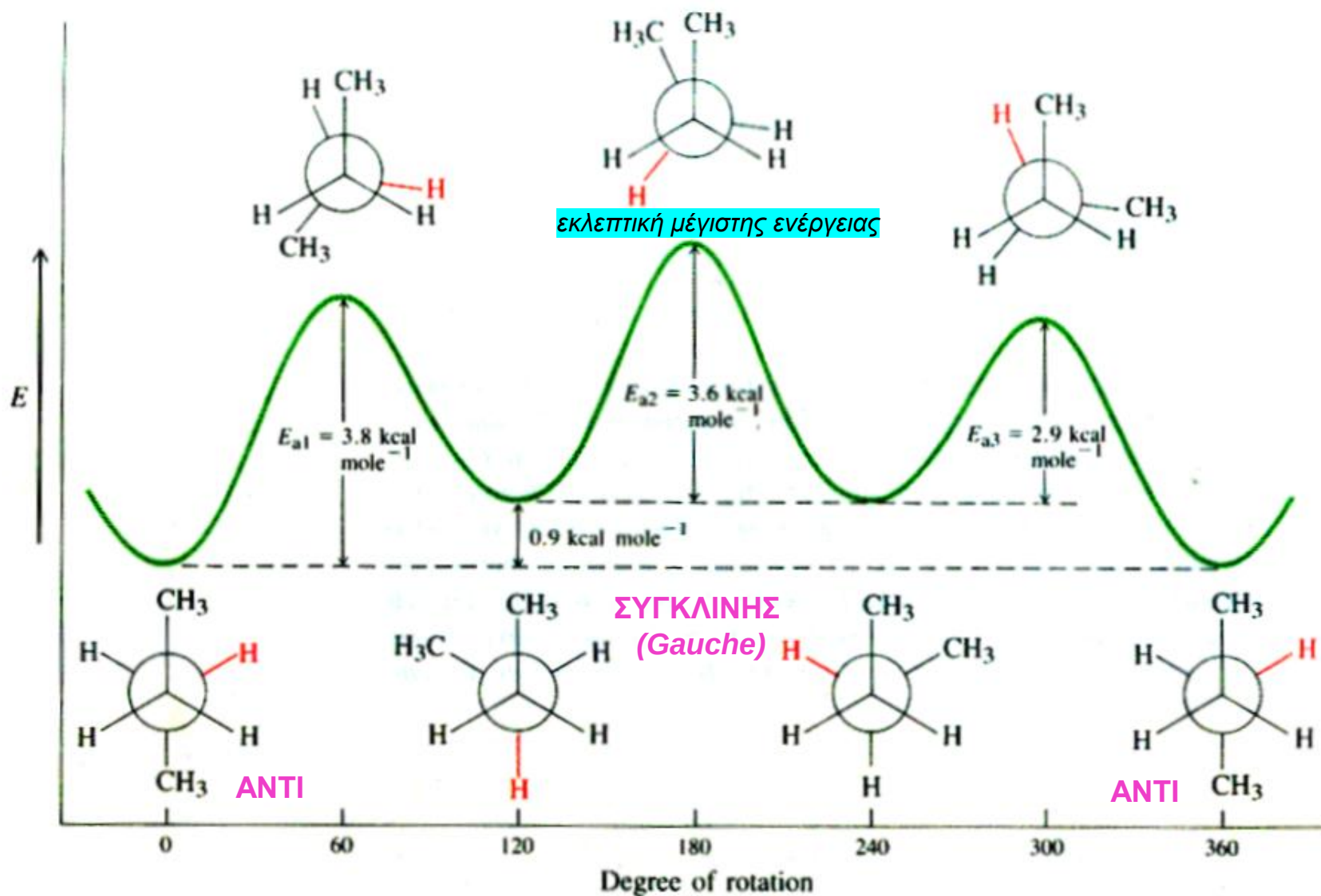
Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

Figure 2.13 Conformations about nonterminal C-C bonds in straight-chain alkanes



Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

Ενεργειακό διάγραμμα διαμορφώσεων βουτανίου



Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

Αποσαφήνιση ορολογίας

Τάση
στρέψης

**Torsional
strain**

Μόνο στην εκλειπτική διαμόρφωση

Στεροχημική
τάση

Steric strain

Στην εκλειπτική διαμόρφωση

και

Στην διαβαθμισμένη διαμόρφωση
(όταν είναι στην *gauche* διαβαθμισμένη)

Διαβαθμισμένη
διαμόρφωση

ANTI

Δεν εμφανίζει τάση

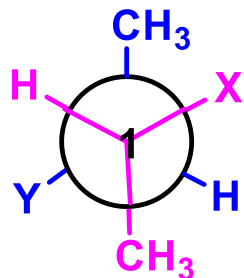
Gauche (συγκλινής)

Εμφανίζει
στεροχημική τάση

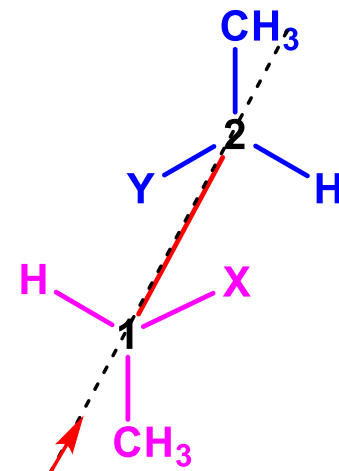
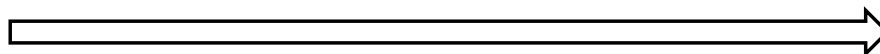
Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

Μετατροπή προβολής Newman σε στερεοχημική δομή και αντιστρόφως

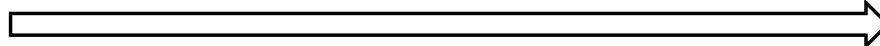
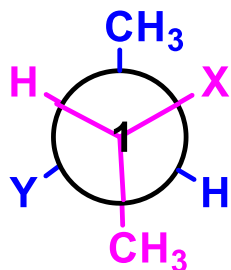
A) Για διαβαθμισμένη διαμόρφωση



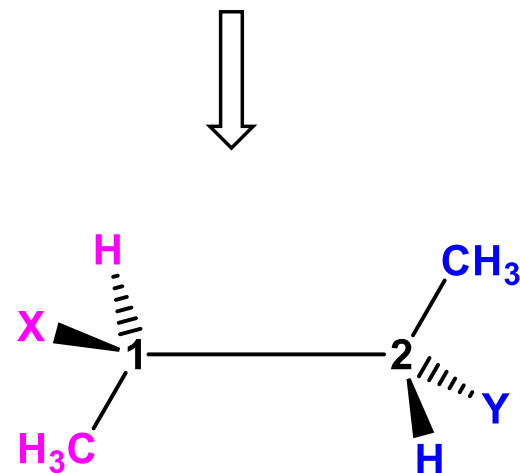
Απομακρύνουμε τον C1 από τον C2



1. Περιστρέφουμε την προβολή Newman κατά 90° ώστε το $-X$ να βρεθεί προς τα έξω και το $-H$ προς το εσωτερικό του επιπέδου του χαρτιού



2. Συγχρόνως το $-Y$ τοποθετείτε προς τα εσωτερικό του επιπέδου και το $-H$ προς το εξωτερικό αυτού.

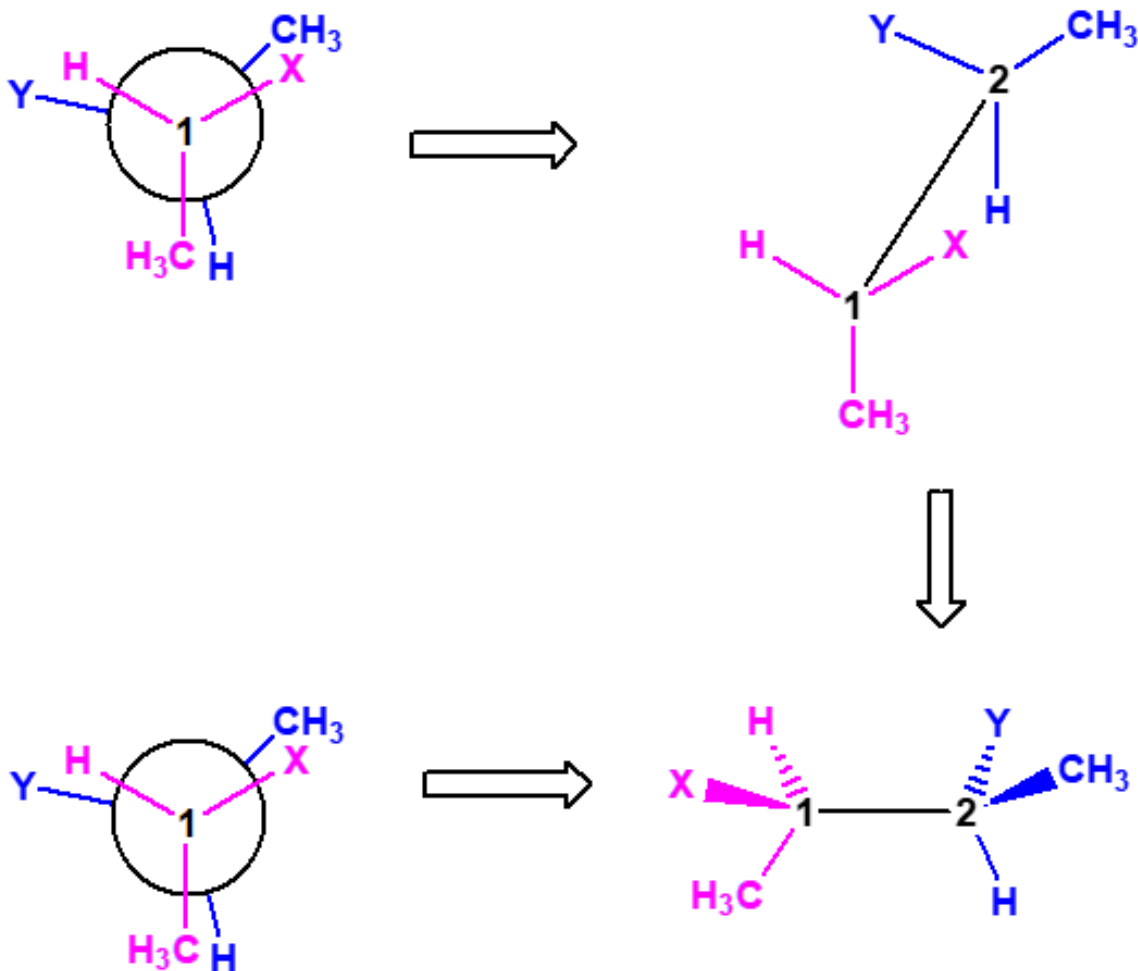


3. Απομακρύνουμε τον C1 από τον C2

Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

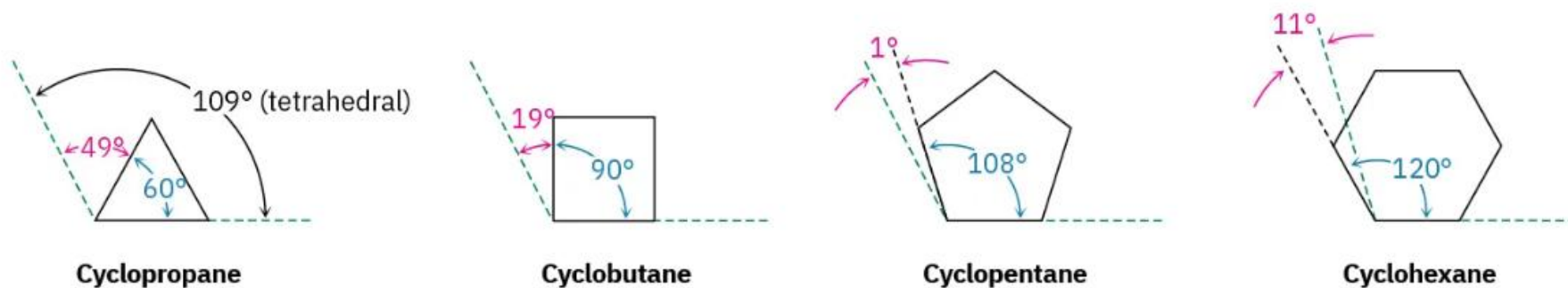
Μετατροπή προβολής Newman σε στερεοχημική δομή και αντιστρόφως

B) Για εκλειπτική διαμόρφωση



Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Στα κυκλοαλκάνια, η περιστροφή γύρω από τους σ δεσμούς C-C περιορίζεται από τον ίδιο τον κύκλο, επομένως **ο αριθμός των πιθανών διαμορφώσεων μειώνεται** σημαντικά σε σύγκριση με τα αλκάνια (μη κυκλικά).



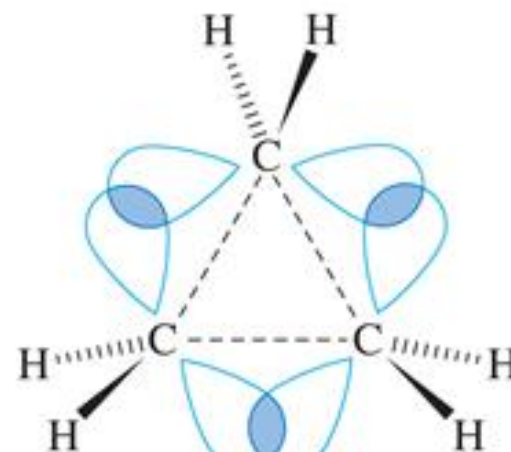
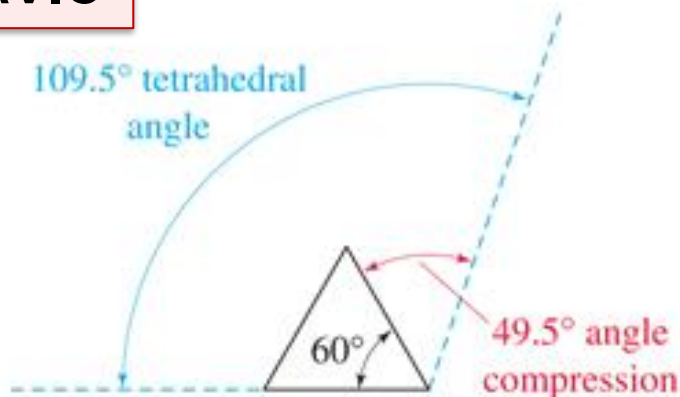
- Σχετίζεται με την άμβλυνση ή μείωση της γωνίας C-C-C πέραν της ιδανικής τιμής των 109.5° (sp^3).

Τάση δακτυλίου = **Γωνιακή τάση** + Τάση στρέψης + Στερεοχημική τάση

Ring Strain = **Angle Strain** + Torsional strain + Steric strain

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοπροπάνιο

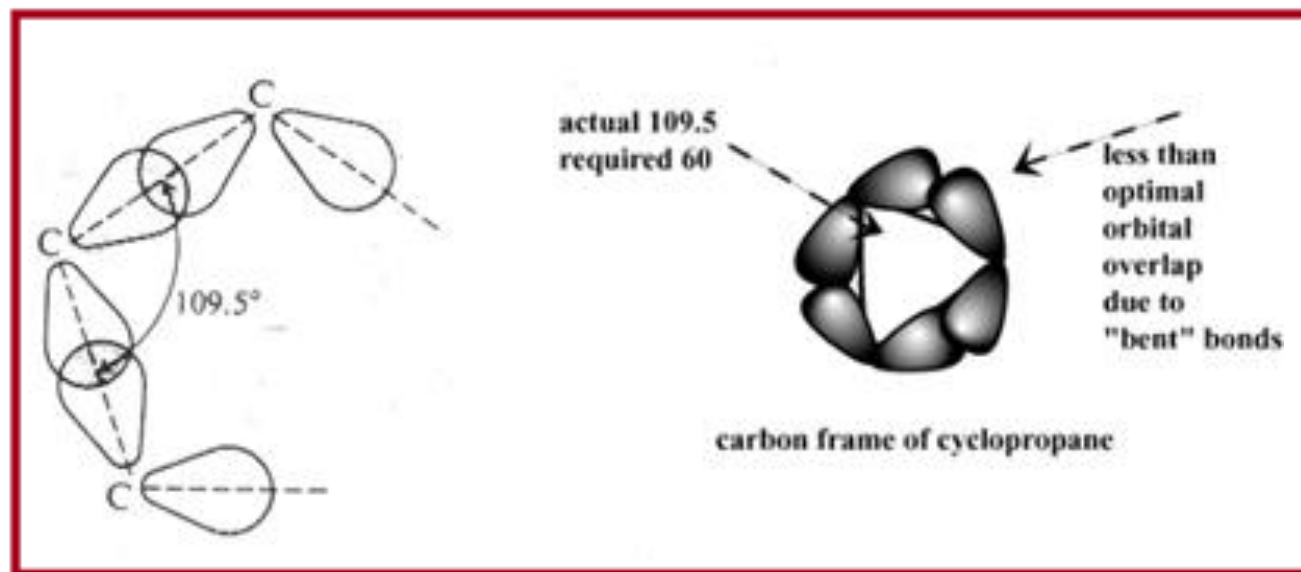


Απόκλιση από τις $109,5^\circ$



Γωνιακή Τάση

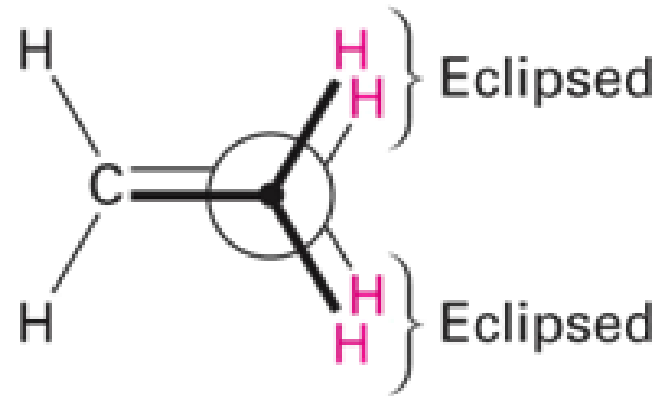
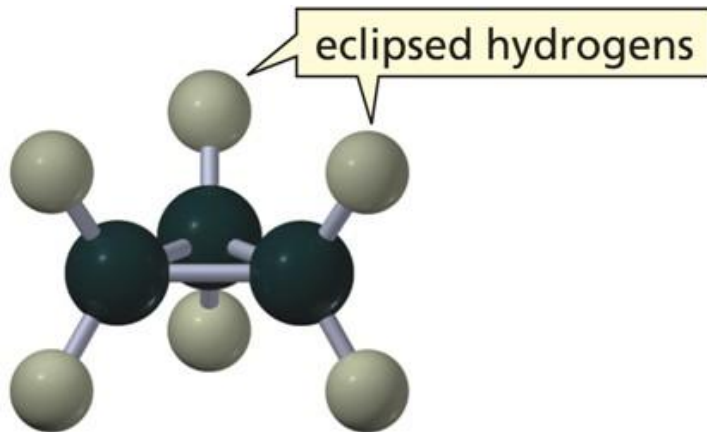
αναποτελεσματική επικάλυψη
αδύναμος δεσμός



Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοπροπάνιο

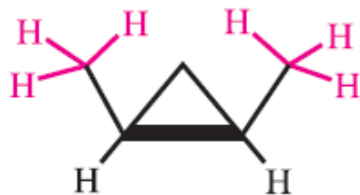
Όλοι οι δεσμοί C-H βρίσκονται σε εκλειπτική διαμόρφωση



Απόκλιση από τη διαβαθμισμένη διαμόρφωση → **Τάση στρέψης**

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

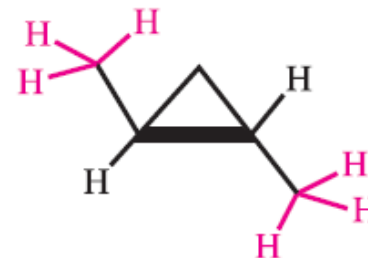
cis - 1,2-διμεθυλοκυκλοπροπάνιο



Μεγαλύτερη θερμότητα καύσης, υποδεικνύει ότι οι δεσμοί αλλά και το μόριο συνολικά έχει **μεγαλύτερη ενέργεια (=λιγότερο σταθερό)**.

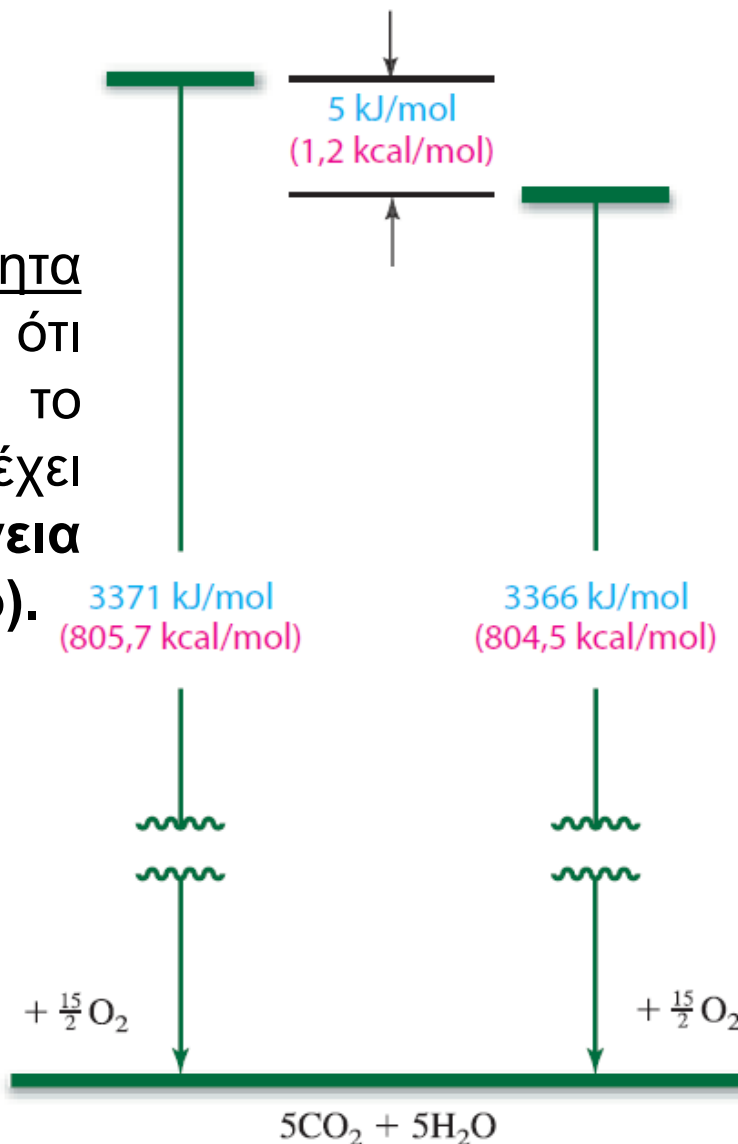
3371 kJ/mol
(805,7 kcal/mol)

trans - 1,2-διμεθυλοκυκλοπροπάνιο



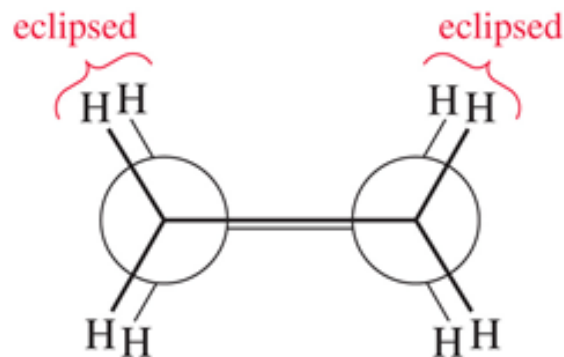
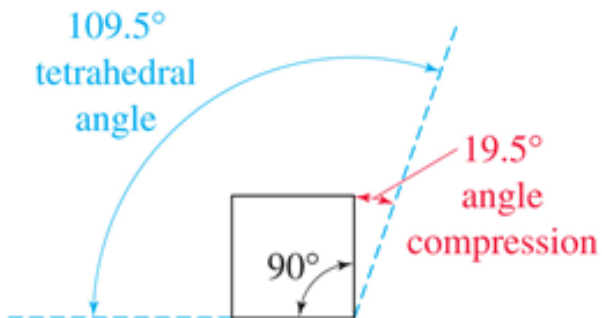
Η σχέση ανάμεσα στη σταθερότητα και τη στερεοχημεία *cis/trans* εξηγείται εύκολα μέσω της στερεοχημικής τάσης. Όταν οι μεθυλομάδες βρίσκονται στην **ίδια πλευρά (cis-)** του δακτυλίου παρεμποδίζουν η μία την άλλη και αυξάνουν τη δυναμική ενέργεια. Όταν βρίσκονται στην **αντίθετη πλευρά (trans-)** δεν εμφανίζεται παρεμπόδιση.

3366 kJ/mol
(804,5 kcal/mol)



Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοβουτάνιο



Newman projection
of planar cyclobutane

Τάση στρέψης

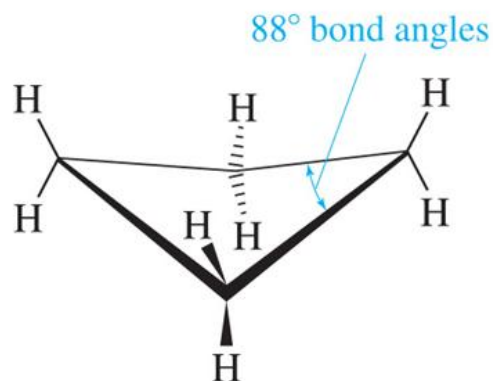
Η γωνία δεσμού στο επίπεδο είναι 90° , δηλαδή έχει απόκλιση κατά $19,5^\circ$ από τις $109,5^\circ$.

Γωνιακή Τάση

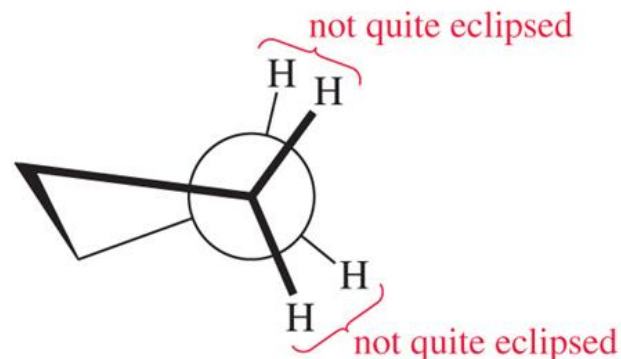
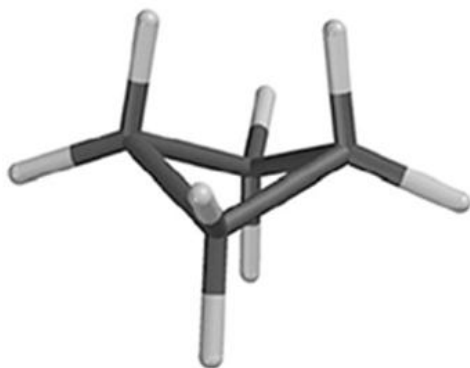
Ωστόσο, σε τρεις διαστάσεις, το κυκλοβουτάνιο είναι αρκετά εύκαμπτο ώστε να λυγίζει σε σχήμα "πεταλούδας", μειώνοντας λίγο τη τάση στρέψης.

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοβουτάνιο



slightly folded conformation



Newman projection of one bond

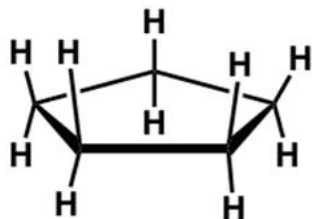
Ελαφριά αύξηση της γωνιακής τάσης,
ωστόσο ελαττώνεται κατά πολύ η τάση στρέψης



σχήμα
"πεταλούδας"

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

ΚΥΚΛΟΠΕΝΤΑΝΙΟ



"Flat" cyclopentane

Interior angle 108°
(no angle strain)

All C-C bonds eclipsed
(**torsional strain!!**)

~10 kcal/mol of torsional strain!

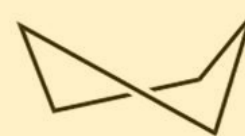


Επίπεδη



Φάκελος

"Envelope" cyclopentane



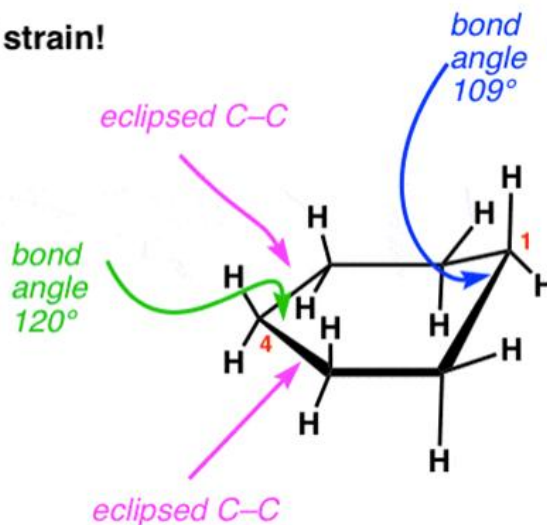
Συνεστραμμένος
Φάκελος

"Twist" cyclopentane

both of these conformations have significantly less torsional strain than the "flat" conformation

not perfectly staggered C-C bonds

About 6 kcal/mol of torsional strain

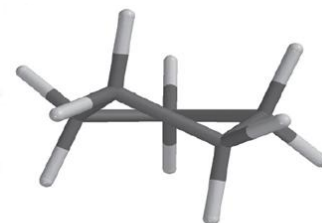


(some relief of angle strain)

"Half chair"

Ring strain 10.8 kcal/mol

- some angle strain (120°)
- torsional strain
(two C-C bonds fully eclipsed, two more partially eclipsed)

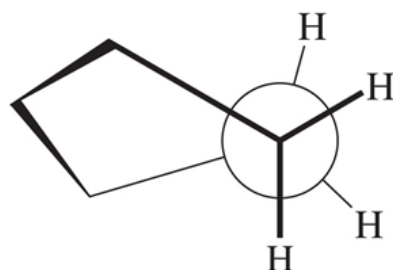
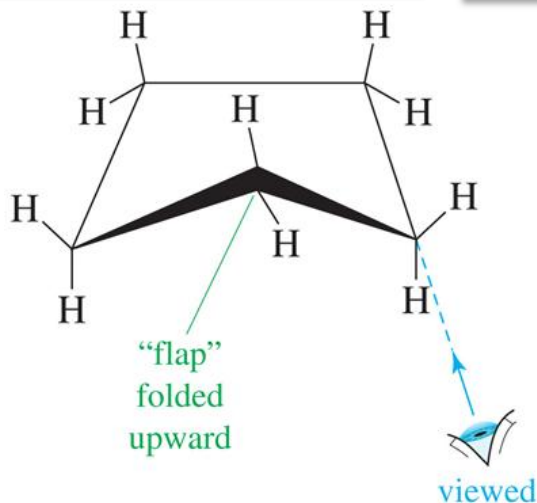


Ημιανάκλιντρο

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

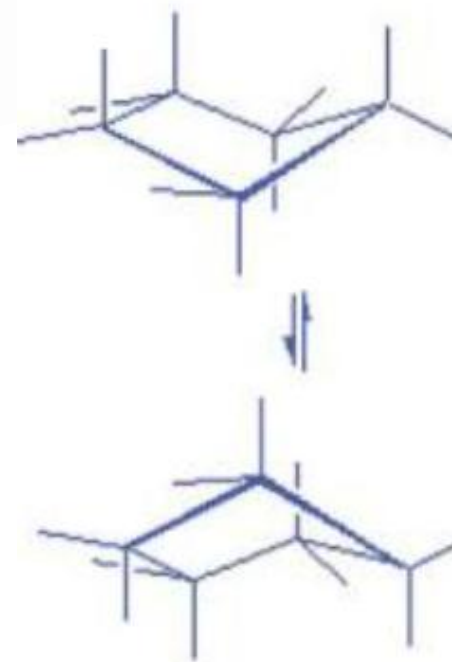
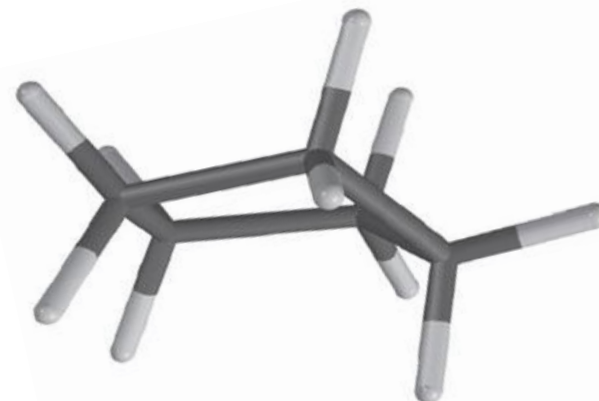
ΚΥΚΛΟΠΕΝΤΑΝΙΟ

Δομή φακέλου



Newman projection
showing relief of
eclipsing of bonds

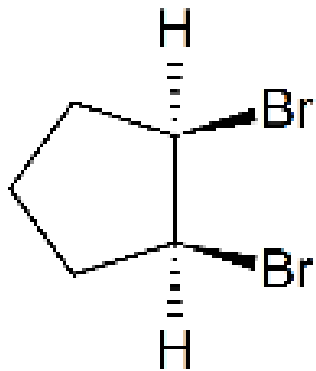
Ελαττώνεται
η τάση στρέψης



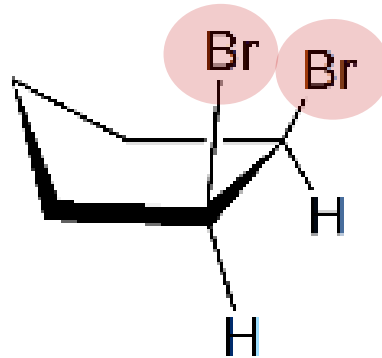
Όλοι οι δεσμοί C-H βρίσκονται σε
διαβαθμισμένη διαμόρφωση

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

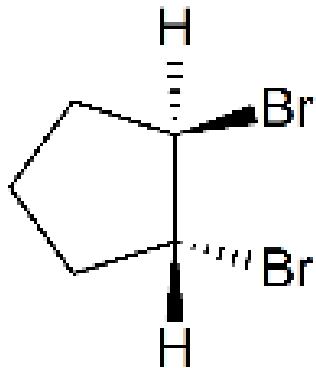
Παράδειγμα 3.1: Να σχεδιαστεί η δομή φακέλου των *cis*-1,2-διβρωμοκυκλοπεντανίου και *trans*-1,2-διβρωμοπεντανίου.



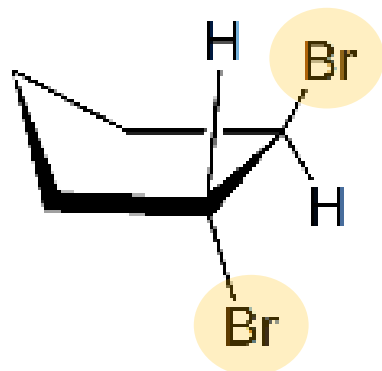
=



cis-1,2-dibromocyclopentane



=

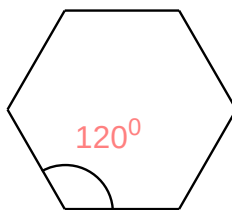


trans-1,2-dibromocyclopentane

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

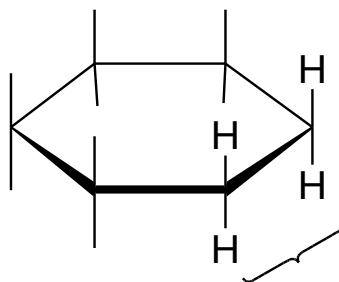
κυκλοεξάνιο

Γωνιακή τάση:



Λόγω απόκλισης της γωνίας C-C-C από την ιδανική τιμή των $109,5^\circ$.

Τάση στρέψης:



Δηλαδή υπάρχει εκλειπτική αλληλεπίδραση των παράλληλων δεσμών C-H

Εκλειπτικοί
δεσμοί

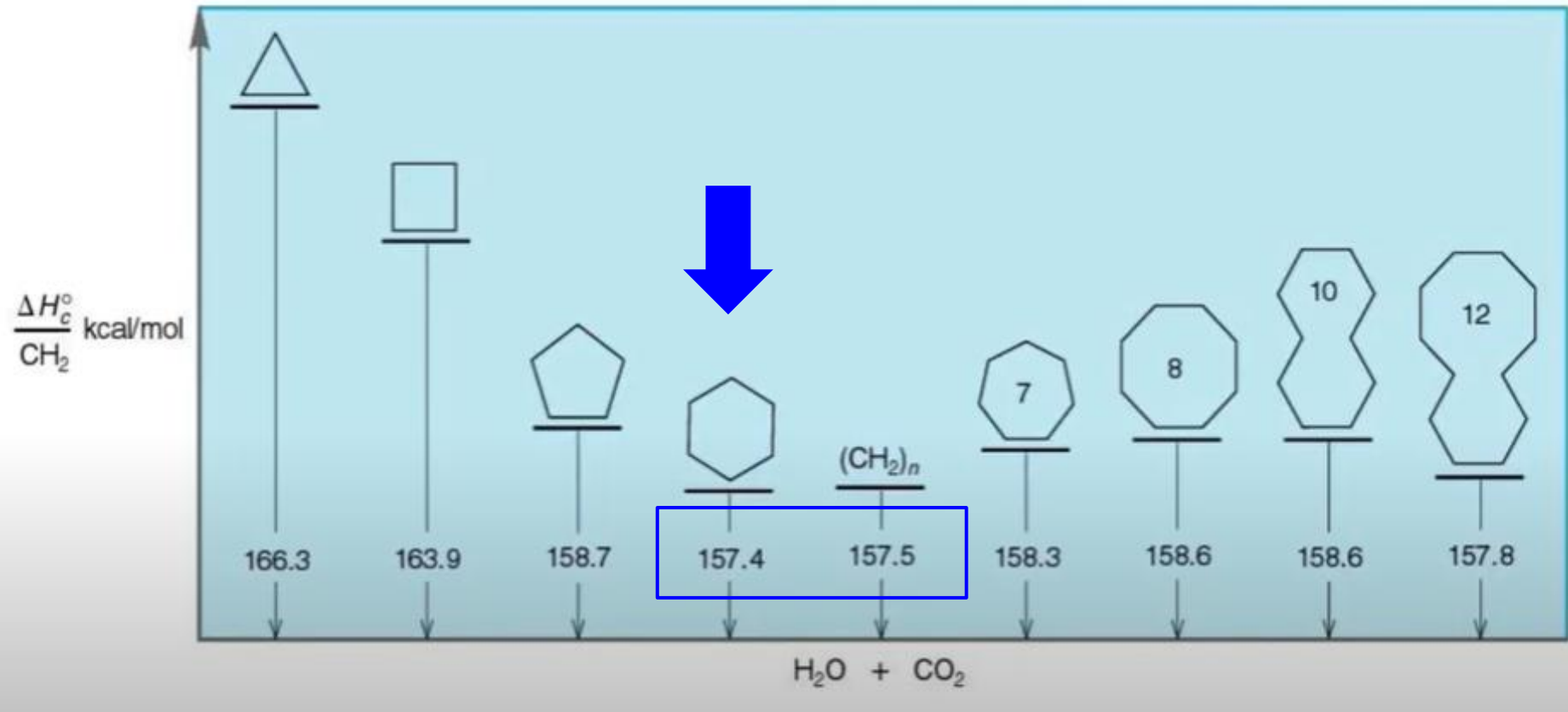
Επίπεδο κυκλοεξάνιο - Μόριο υψηλής δυναμικής ενέργειας

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο



Θερμότητες καύσης



Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Κυκλοεξάνιο

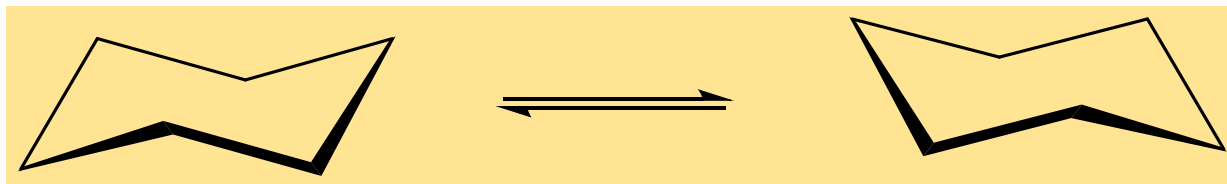
Κυκλοαλκάνιο	Αριθμός μεθυλομάδων	Θερμότητα Καύσης		Θερμότητα καύσης ανά μεθυλομάδα	
		kJ/mol	kcal/mol	kJ/mol	kcal/mol
Κυκλοπροπάνιο	3	2.091	499,8	697	166,6
Κυκλοβουτάνιο	4	2.745	656,1	686	164,0
Κυκλοπεντάνιο	5	3.320	793,4	664	158,7
Κυκλοεξάνιο	6	3.953	944,7	659	157,5
Κυκλοεπτάνιο	7	4.637	1108,4	662	158,3
Κυκλοοκτάνιο	8	5.310	1269,2	664	158,7
Κυκλοεννεάνιο	9	5.981	1429,6	665	158,8
Κυκλοδεκάνιο	10	6.639	1587,8	664	158,7
Κυκλοεντεκάνιο	11	7.293	1743,2	663	158,5
Κυκλοδωδεκάνιο	12	7.992	1893,4	660	157,8
Κυκλοδεκατεσσεράνιο	14	9.234	2207,0	660	157,6
Κυκλοδεκαεξάνιο	16	10.548	2521,0	659	157,6

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

ΚΥΚΛΟΕΞΆΝΙΟ



“Chair Conformation”



Αναστροφή δακτυλίου

Ισοδύναμες διαμορφώσεις ανακλίντρου



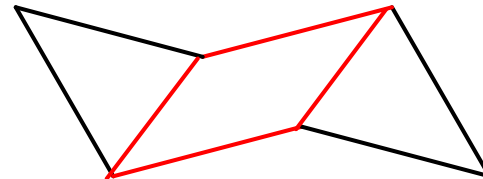
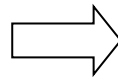
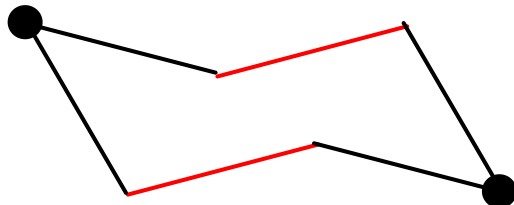
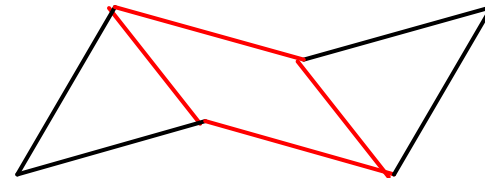
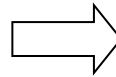
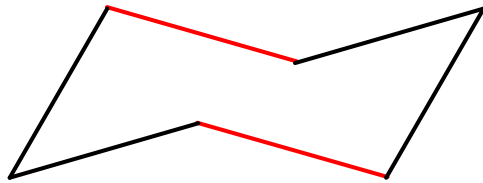
Το κυκλοεξάνιο υιοθετεί μία πτυχωμένη διαμόρφωση στην οποία, όλες οι γωνίες C-C-C είναι $109,5^\circ$ ($C\ sp^3$) και όλοι οι γειτονικοί δεσμοί C-H είναι διαβαθμισμένοι. Σε αυτό οφείλεται και η μεγάλη σταθερότητα του κυκλοεξανικού ανακλίντρου.

$$\text{Τάση δακτυλίου (γωνιακή τάση + τάση στρέψης)} = 0.0 \text{ Kcal mol}^{-1}$$

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

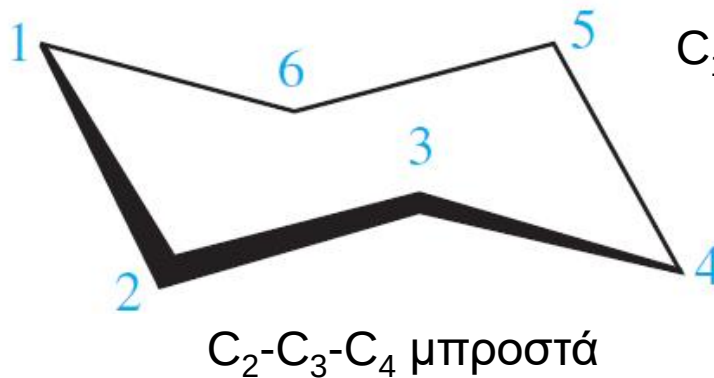
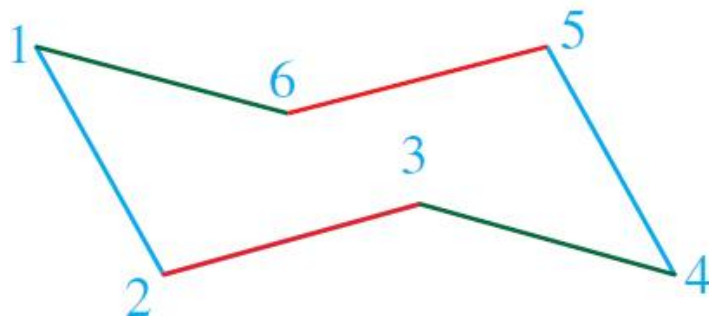
Σωστή σχεδίαση ανακλίντρου



Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Σωστή σχεδίαση ανακλίντρου



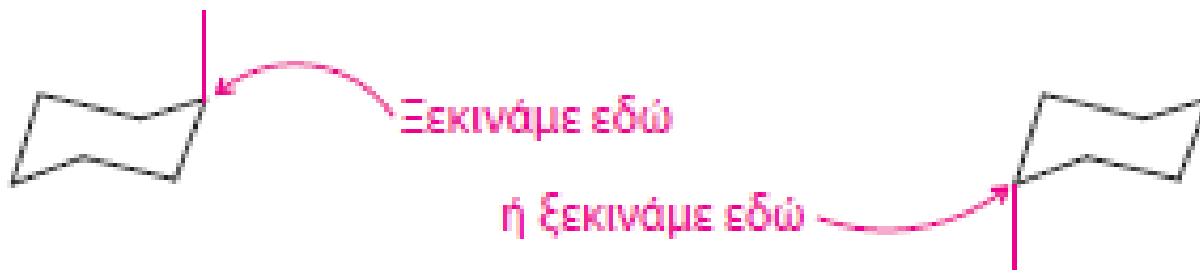
Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

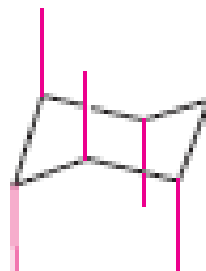
(1) Πρώτα σχεδιάζουμε τη διαμόρφωση ανακλίντρου του κυκλοεξανίου.



(2) Έπειτα σχεδιάζουμε τους αξονικούς δεσμούς, εναλλάσσοντας την κατεύθυνση στα γειτονικά άτομα άνθρακα. Ξεκινάμε τοποθετώντας είτε έναν δεσμό προς τα επάνω σε άνθρακα που βρίσκεται στις πάνω κορυφές του ανακλίντρου, είτε έναν δεσμό προς τα κάτω σε άνθρακα που βρίσκεται στις κάτω κορυφές του ανακλίντρου.



Τοποθετούμε εναλλάξ έτσι ώστε

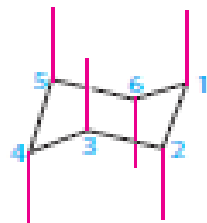


όλοι οι αξονικοί δεσμοί
να είναι παράλληλοι
μεταξύ τους

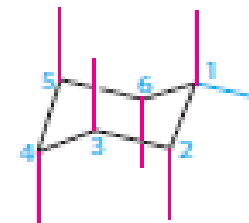
Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

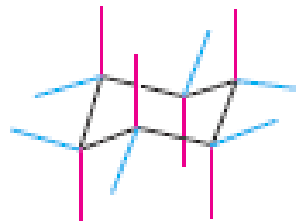
- (3) Τοποθετούμε τους ισημερινούς δεσμούς ώστε κάθε άνθρακας να αποκτά τετραεδρική διάταξη. Ο ισημερινός δεσμός σε κάθε άνθρακα πρέπει να είναι παράλληλος με τον δεσμό C—C των επόμενων δύο γειτονικών του ανθράκων.



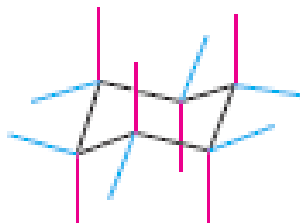
Τοποθετούμε τον ισημερινό δεσμό στον C-1, έτσι ώστε να είναι παράλληλος με τους δεσμούς C2-C3 και C5-C6.



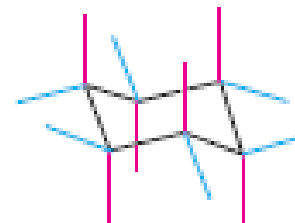
Ακολουθώντας αυτό το σύστημα σχεδιάζουμε όλους τους ισημερινούς δεσμούς.



- (4) Εξασκηθείτε στον σχεδιασμό ενός ανακλίντρου με προσανατολισμό και προς τις δύο κατευθύνσεις.



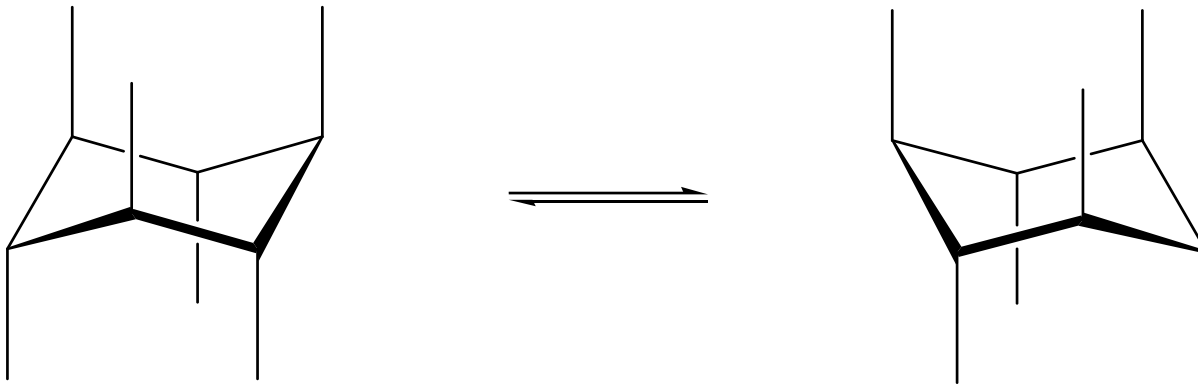
και



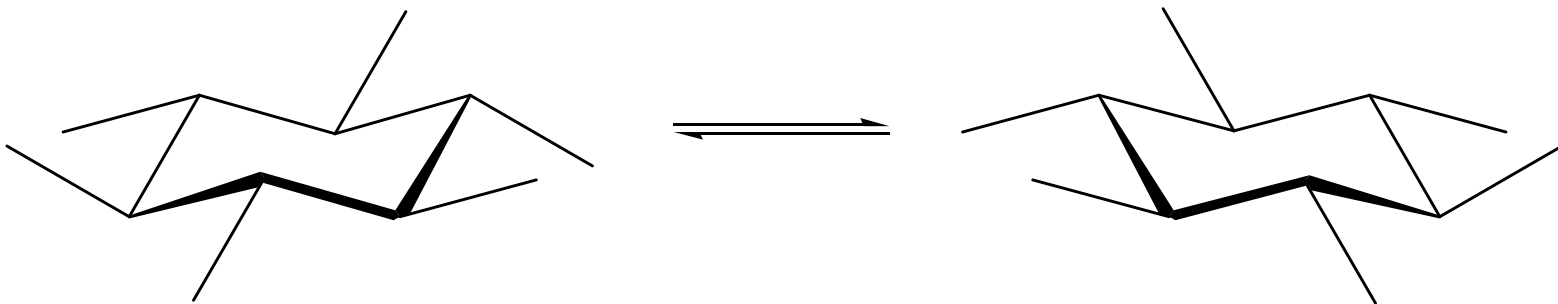
Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Αξονικοί δεσμοί



Ισημερινοί δεσμοί

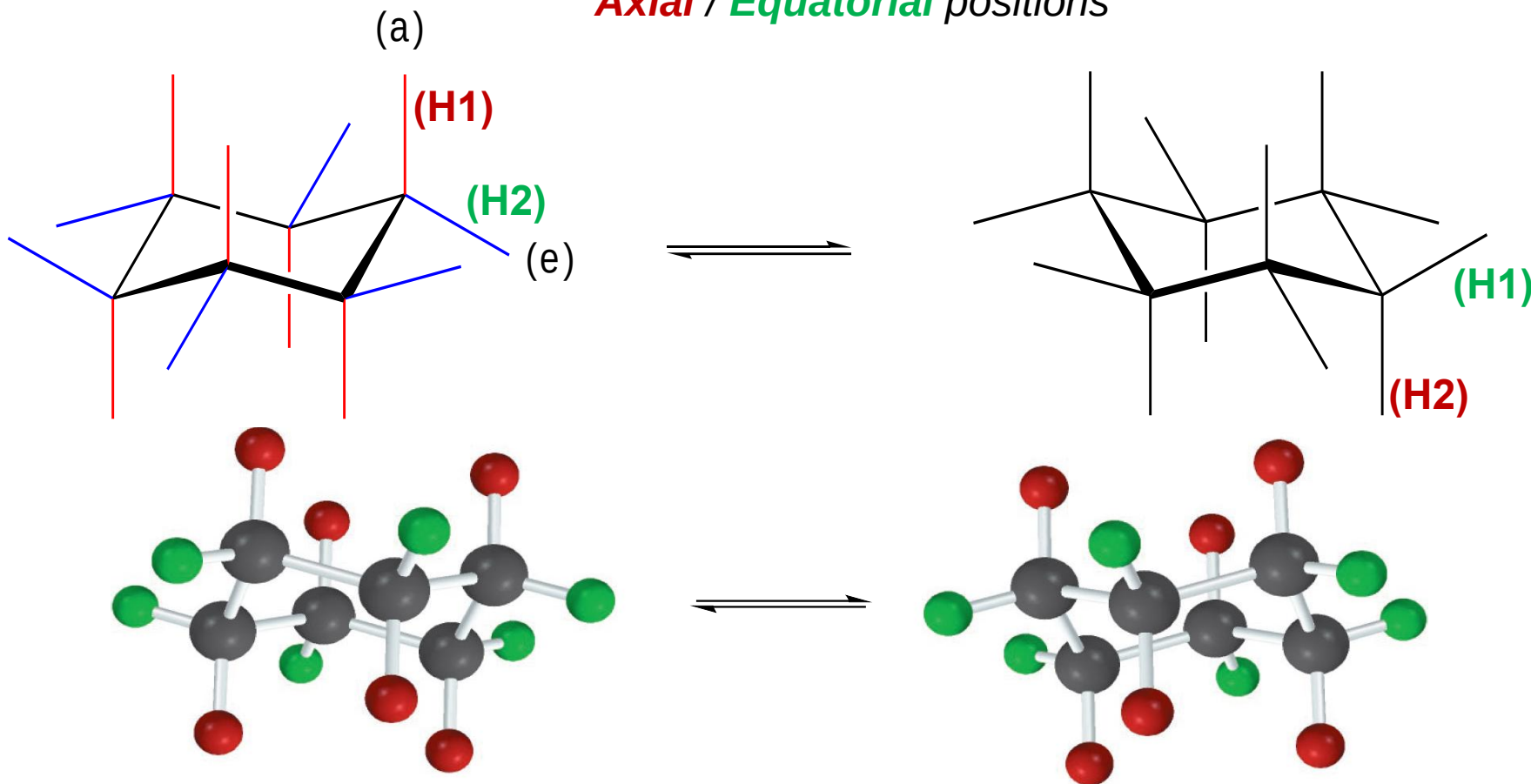


Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Αναστροφή δακτυλίου

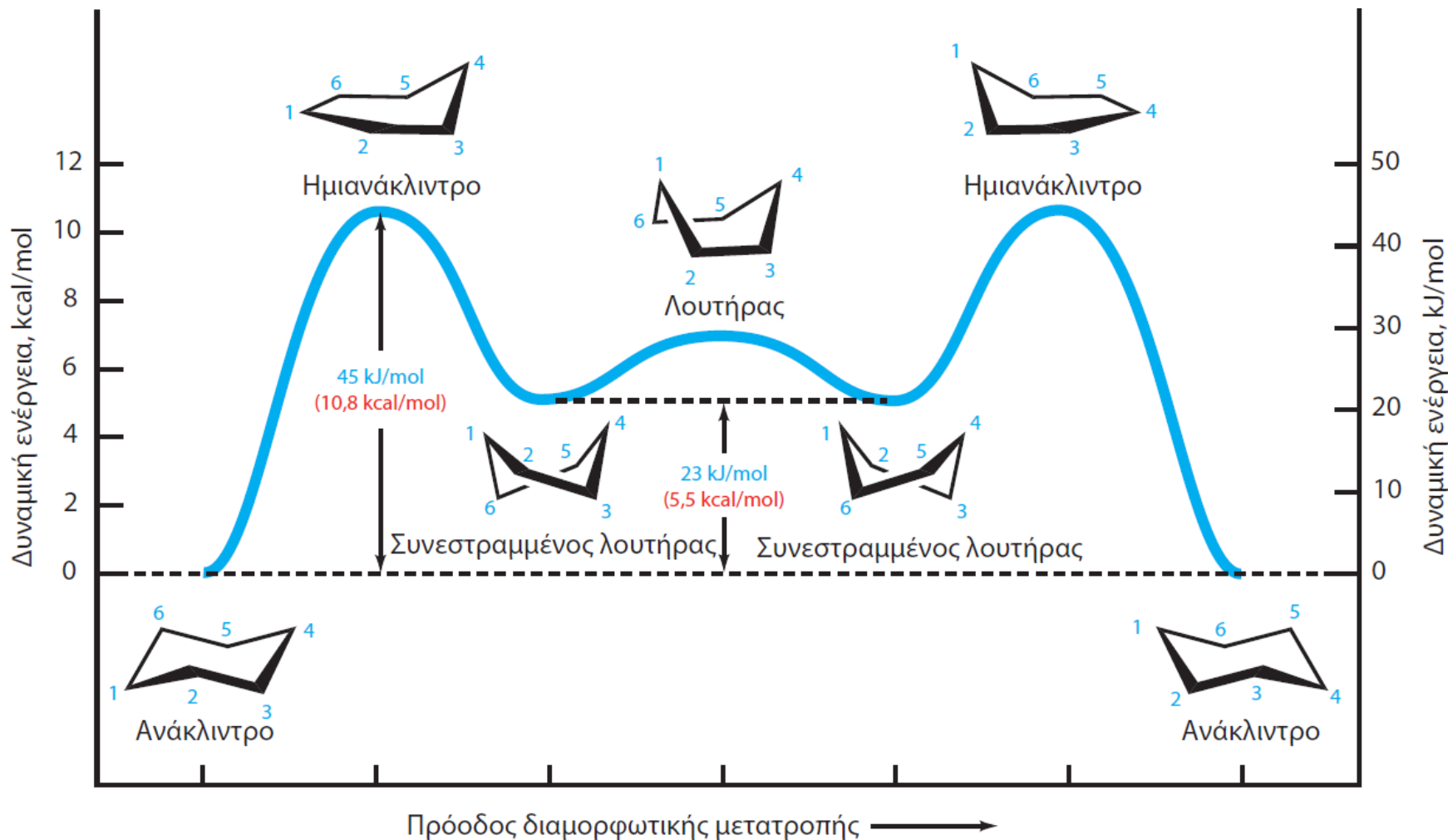
Axial / *Equatorial* positions



Το ανάκλιντρο αλλάζει πολύ γρήγορα διαμόρφωση και μετατρέπεται σε μία άλλη διαμόρφωση ανακλίντρου.

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

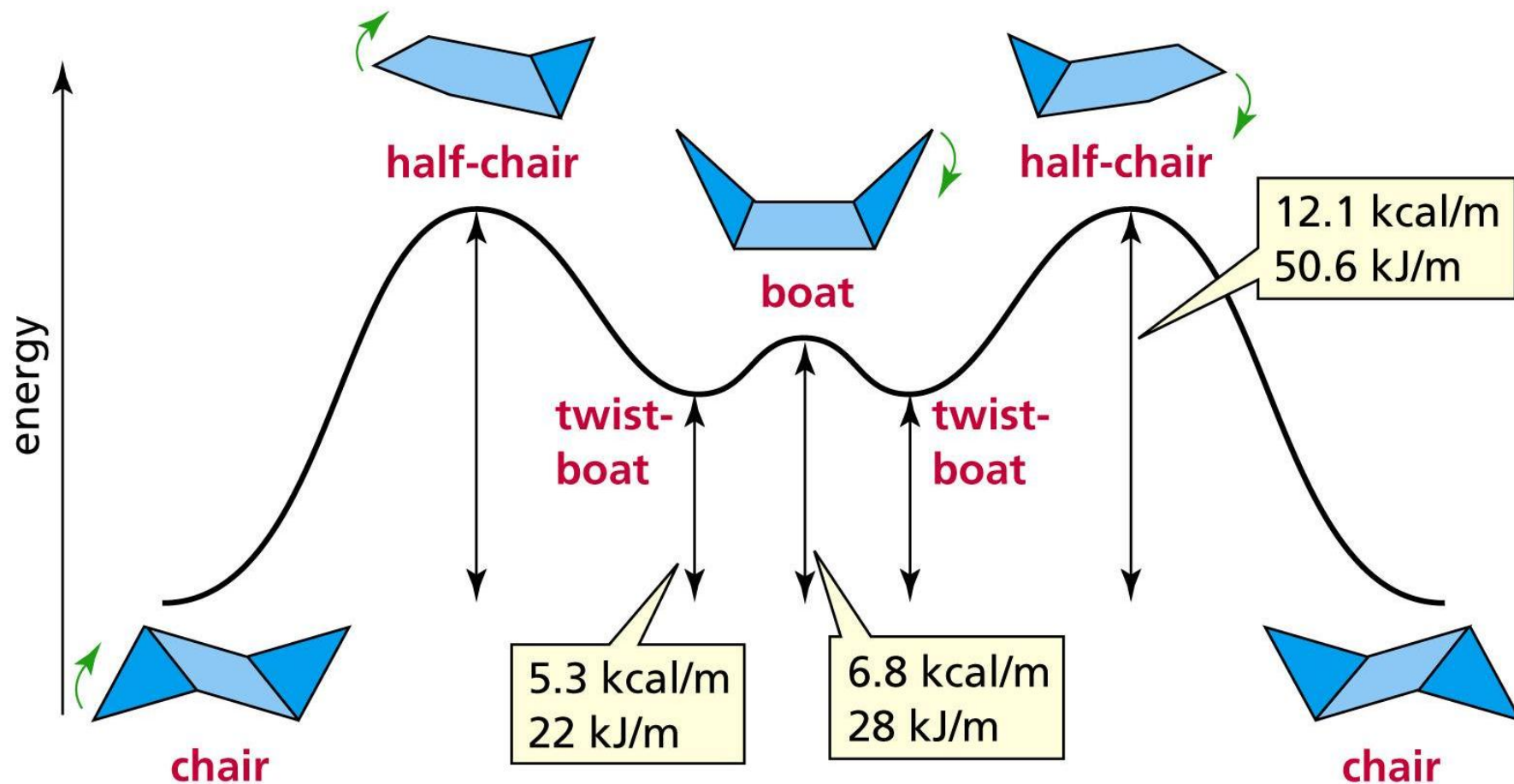
κυκλοεξάνιο



Σε θερμοκρασία δωματίου η εναλλαγή μεταξύ των διαμορφώσεων του κυκλοεξανίου γίνεται πολύ γρήγορα.

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

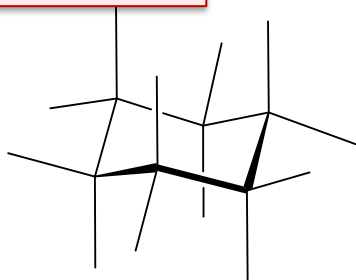


Σε θερμοκρασία δωματίου η εναλλαγή μεταξύ των διαμορφώσεων του κυκλοεξανίου γίνεται πολύ γρήγορα.

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

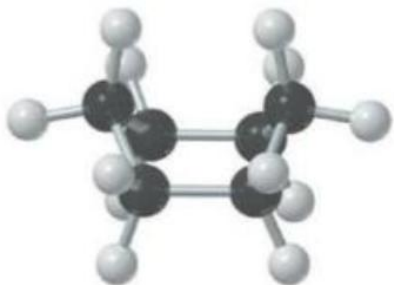
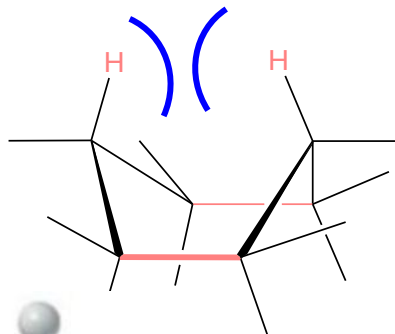
ΚΥΚΛΟΕΞΆΝΙΟ

Ανάκλιντρο (Chair)



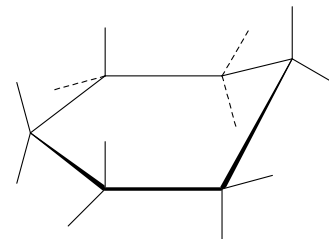
Καθόλου γωνιακή τάση
Καθόλου τάση στρέψης
Μικρή στερεοχημική τάση
E = 0 kcal/mol

Λουτήρας (Boat)



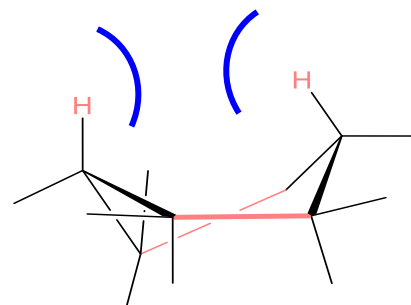
Μικρή γωνιακή τάση
Τάση στρέψης
Στερεοχημική τάση μεταξύ H-H
E = 6,8 kcal/mol

Ημιανάκλιντρο (Half chair)



Μικρή γωνιακή τάση
Υψηλή τάση στρέψης
Μικρή στερεοχημική τάση
E = 12,1 kcal/mol

Συνεστραμμένος λουτήρας (Twist boat)

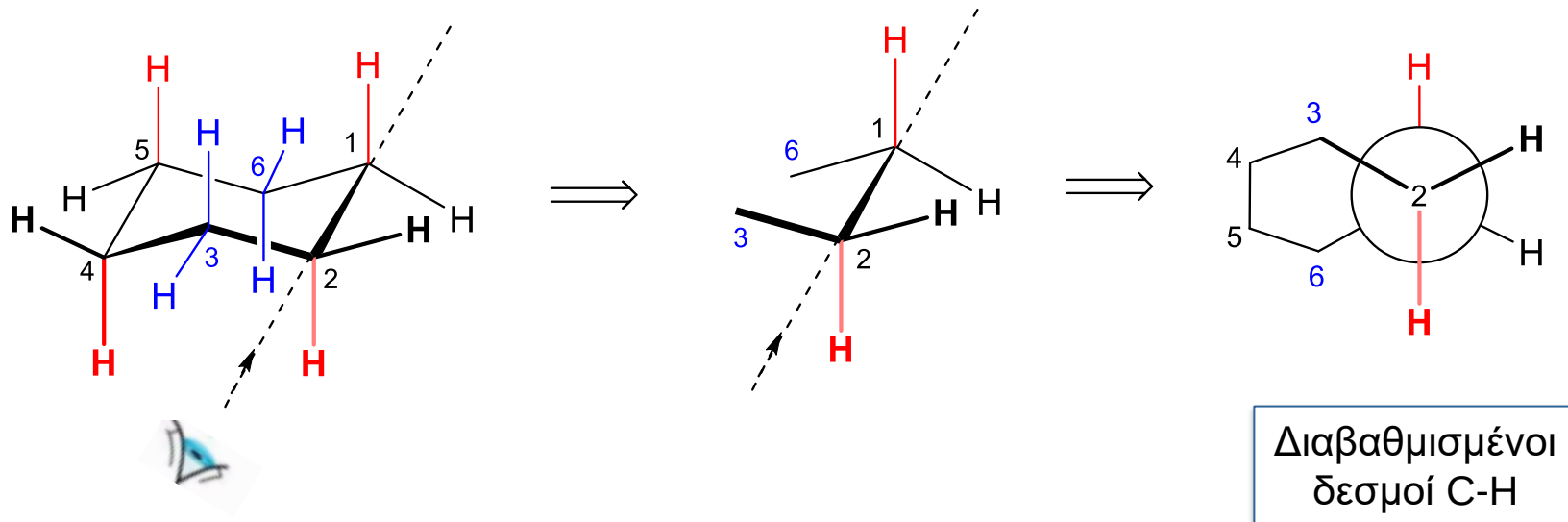


Μικρή γωνιακή τάση
Μικρή τάση στρέψης
Μικρή στερεοχημική τάση μεταξύ H-H
E = 5,3 kcal/mol

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Προβολή Newman
μη υποκατεστημένου κυκλοεξανίου

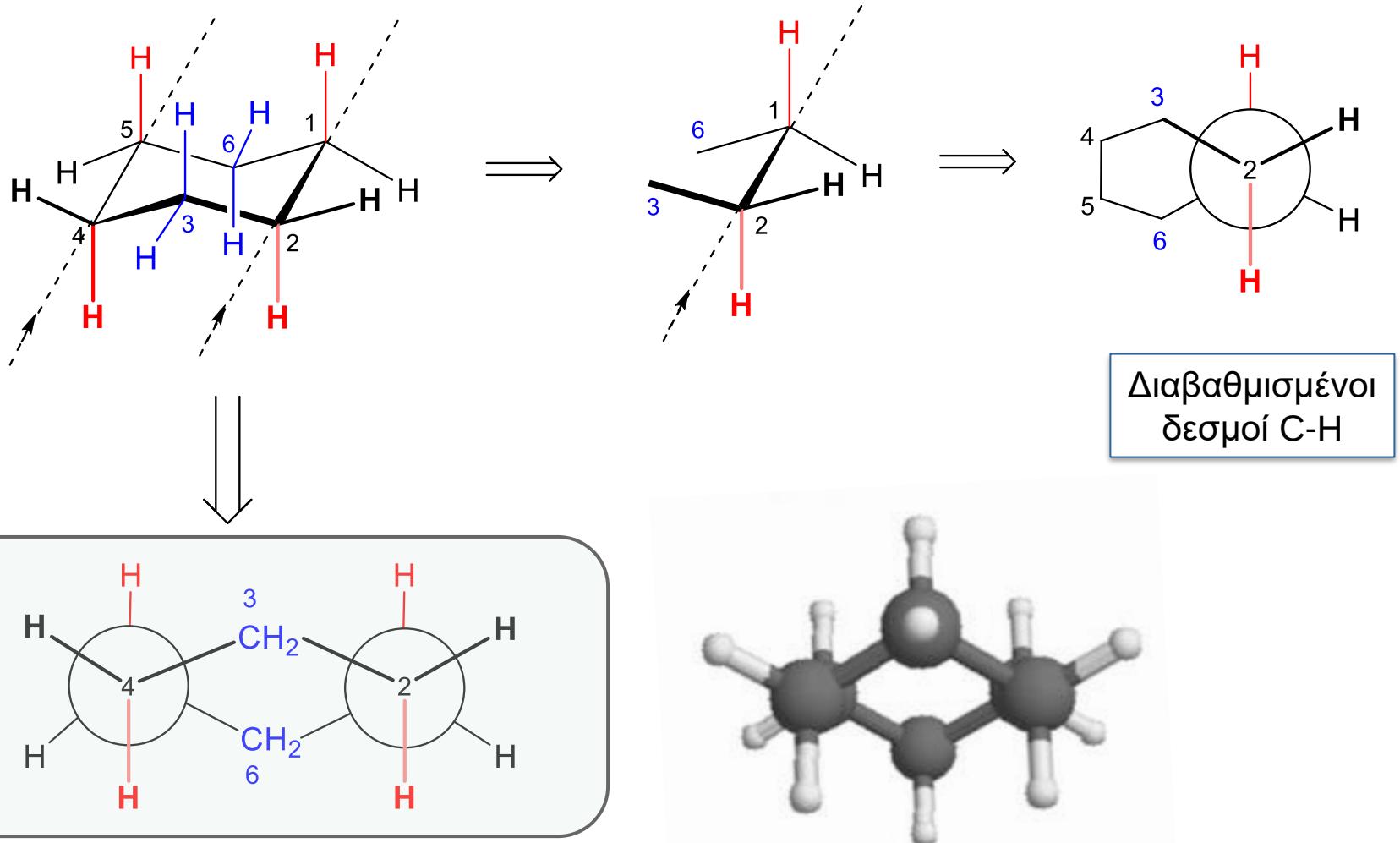


Όποιον δεσμό C-C και να προβάλουμε σε ένα μη υποκατεστημένο κυκλοεξάνιο θα έχουμε **διαβαθμισμένη διαμόρφωση**.

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

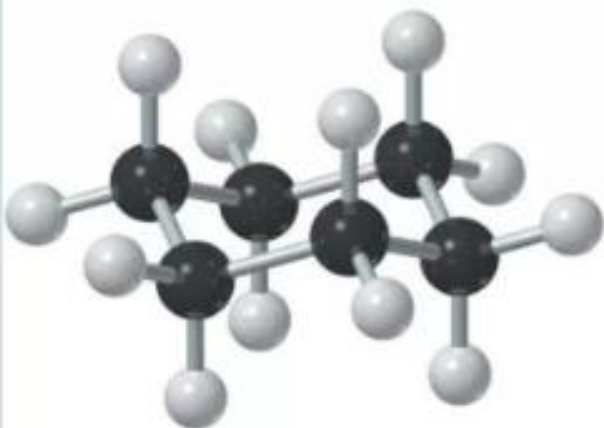
Προβολή Newman
μη υποκατεστημένου κυκλοεξανίου



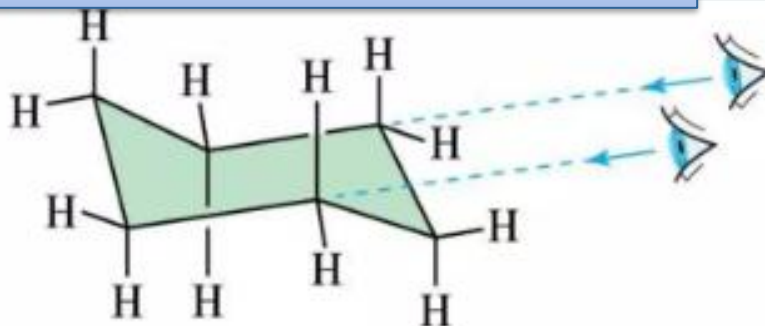
Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

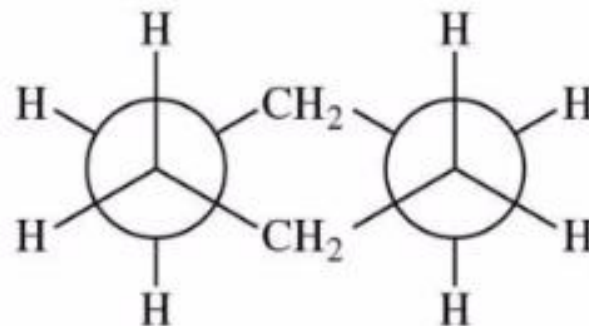
Προβολή Newman
μη υποκατεστημένου κυκλοεξανίου



Ανάκλιντρο



Διαβαθμισμένοι
δεσμοί C-H

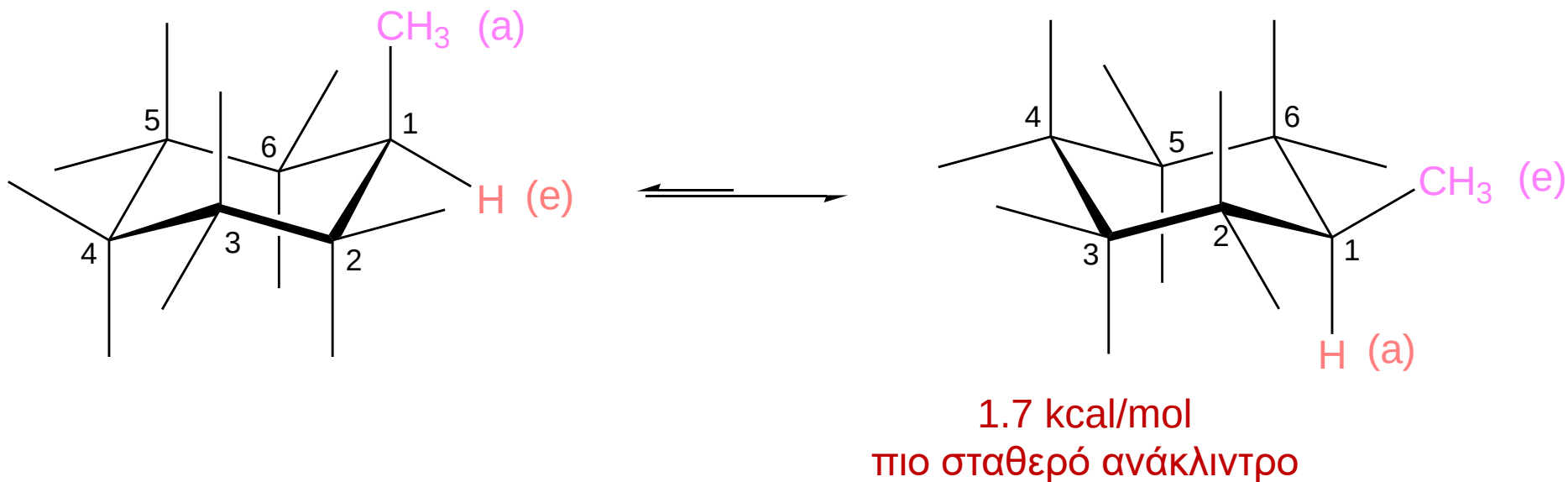


Η χαμηλότερης ενέργειας διαμόρφωση του κυκλοεξανίου

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Διαμορφώσεις μονοϋποκατεστημένων κυκλοεξανίων

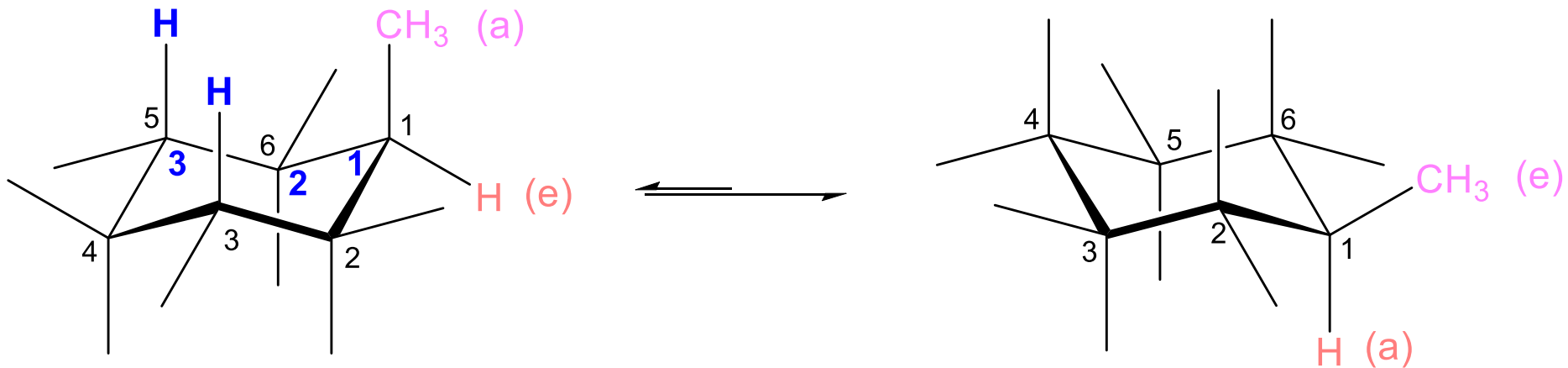


Για τα μονοϋποκατεστημένα κυκλοεξάνια, η σταθερότερη διαμόρφωση είναι εκείνη στην οποία ο υποκαταστάτης βρίσκεται σε ισημερινή θέση.

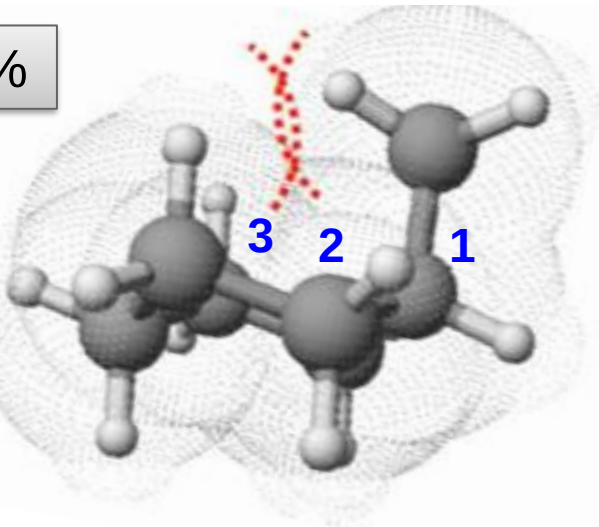
Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

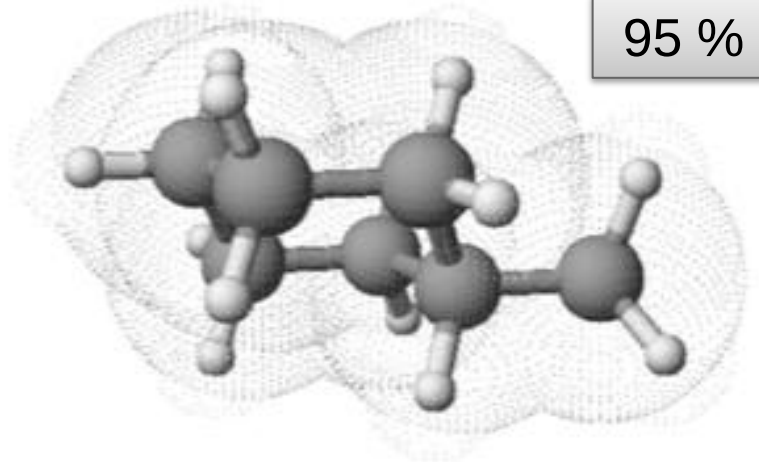
Διαμορφώσεις μονοϋποκατεστημένων κυκλοεξανίων



5 %



95 %

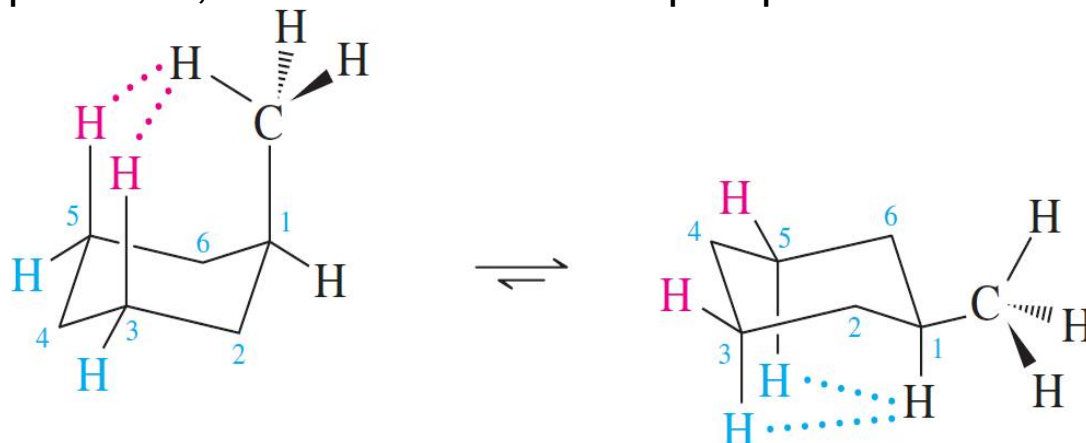


Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

ΚΥΚΛΟΕΞΆΝΙΟ

Η ενεργειακή διαφορά ανάμεσα στα αξονικά και ισημερινά διαμορφωμερή οφείλεται στη **στεreoχημική τάση**, η οποία προκαλείται από τις απωστικές **1,3-διαξονικές αλληλεπιδράσεις/απώσεις** ανάμεσα στο αξονικό μεθύλιο του C1 και τα αξονικά υδρογόνα των ανθράκων C3 και C5. Στο ισημερινό μεθυλοκυκλοεξάνιο οι αλληλεπιδράσεις αυτές δεν υφίστανται, οπότε είναι και σταθερότερο.

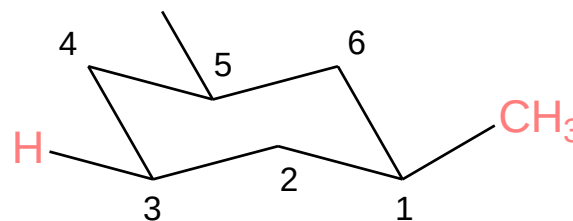
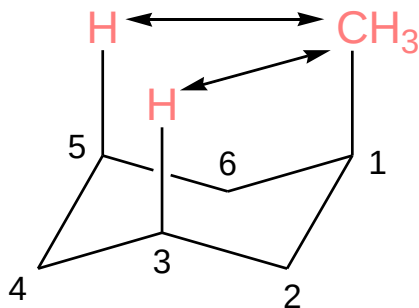
1,3-διαξονικές αλληλεπιδράσεις



Σtereoχημική τάση ανάμεσα στην αξονική μεθυλομάδα και στα αξονικά υδρογόνα των C-3 και C-5.

Αμελητέα stereoχημική τάση ανάμεσα στο υδρογόνο του C-1 και στα αξονικά υδρογόνα των C-3 και C-5.

5 %



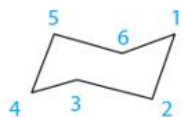
95 %

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

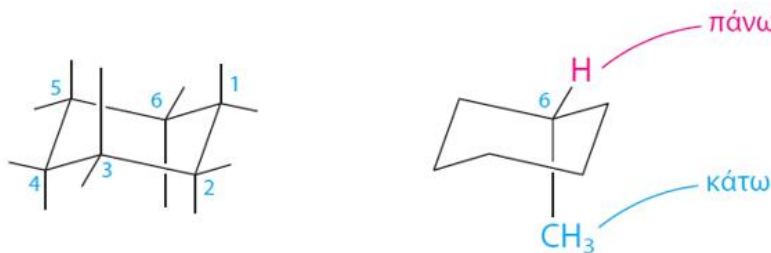
Πρόβλημα 3.10

Οι ερωτήσεις αφορούν τη δομή ανακλίντρου που φαίνεται παρακάτω.



- α) Μια μεθυλομάδα που βρίσκεται στον C-6 προς τα κάτω είναι αξονική ή ισημερινή;
- β) Μια μεθυλομάδα που βρίσκεται στον C-1 προς τα πάνω είναι λιγότερο ή περισσότερο σταθερή από μια μεθυλομάδα που βρίσκεται στον C-4 προς τα πάνω;
- γ) Τοποθετήστε μια μεθυλομάδα στον C-3 ώστε να έχει το σταθερότερο προσανατολισμό. Βρίσκεται πάνω ή κάτω από το επίπεδο του κυκλοεξανίου;

Υπόδειγμα λύσης (α) Πρώτα τοποθετούμε όλους του δεσμούς επάνω στον κυκλοεξανικό δακτύλιο με τις σωστές κατευθύνσεις τους. Ένας υποκαταστάτης λέμε ότι βρίσκεται προς τα κάτω όταν είναι χαμηλότερα από τον άλλον υποκαταστάτη του ίδιου άνθρακα. Άρα, η μεθυλομάδα στον C-6 είναι αξονική.

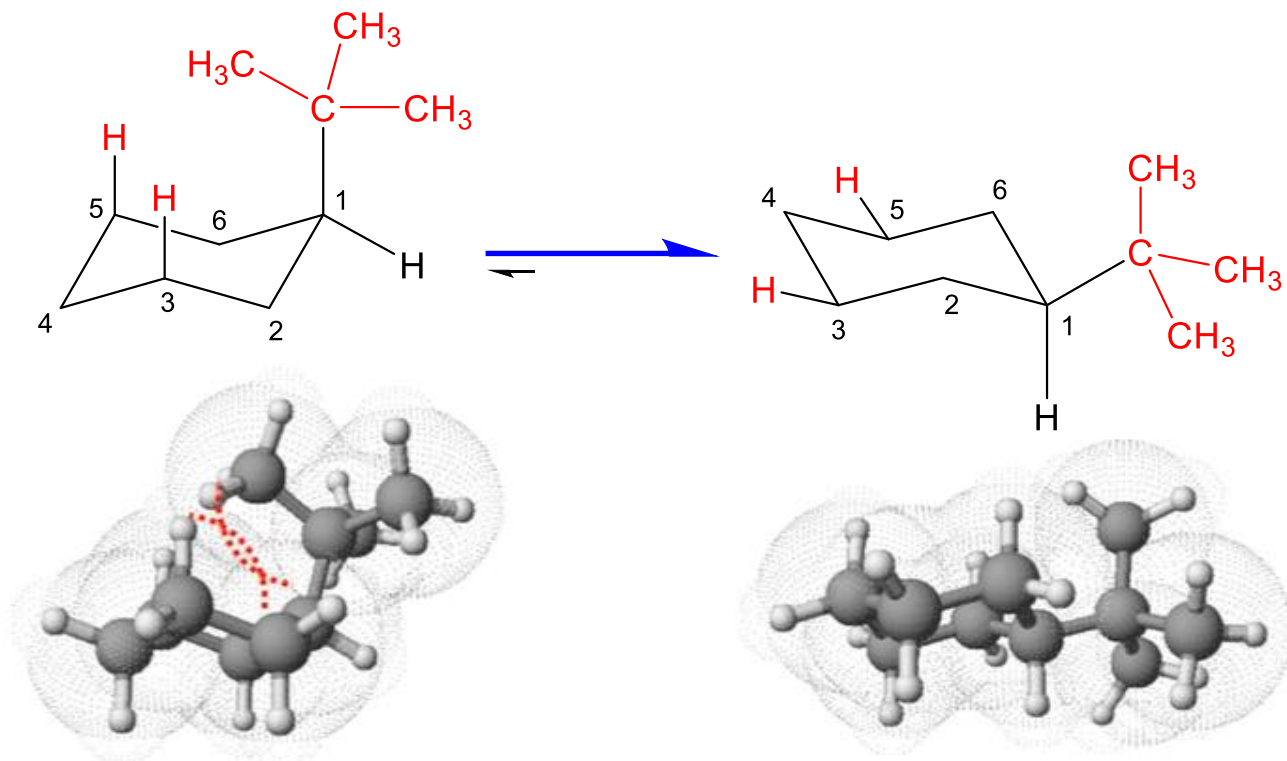


Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Το μέγεθος της 1,3-διαξονικής στερεοχημικής τάσης σε ένα μονοϋποκατεστημένο κυκλοεξάνιο εξαρτάται από το μέγεθος του αξονικού υποκαταστάτη.

Όσο μεγαλύτερος ο υποκαταστάτης τόσο μεγαλύτερες οι 1,3-διαξονικές αλληλεπιδράσεις, οπότε η ενεργειακή διαφορά του ισημερινού από το αξονικό διαμορφομερές καθίσταται μεγαλύτερη.

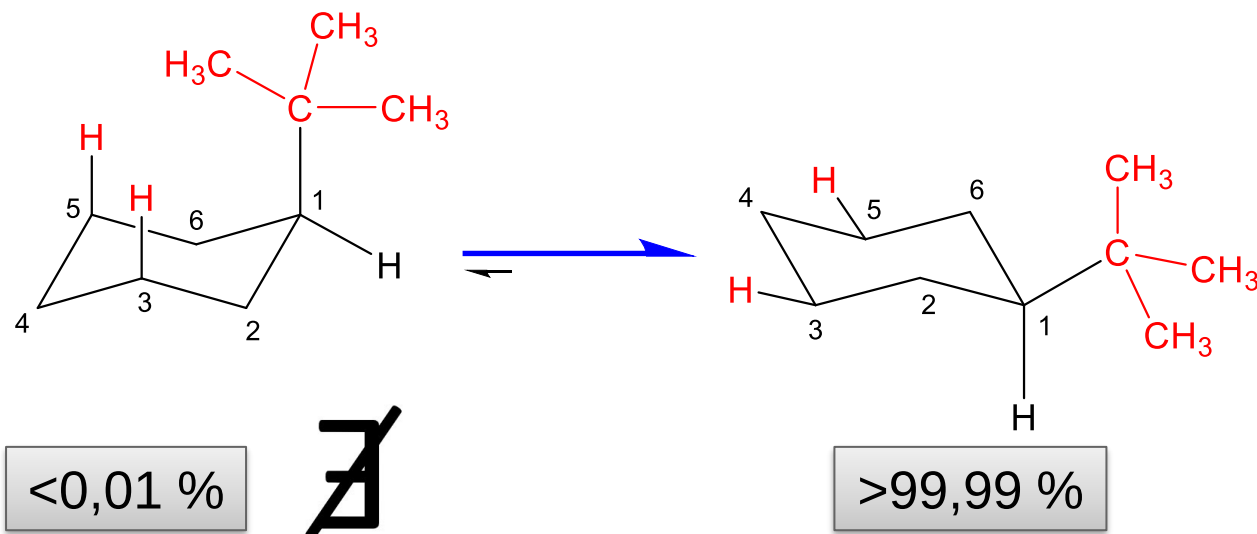


Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Το μέγεθος της 1,3-διαξονικής στερεοχημικής τάσης σε ένα μονοϋποκατεστημένο κυκλοεξάνιο εξαρτάται από το μέγεθος του αξονικού υποκαταστάτη.

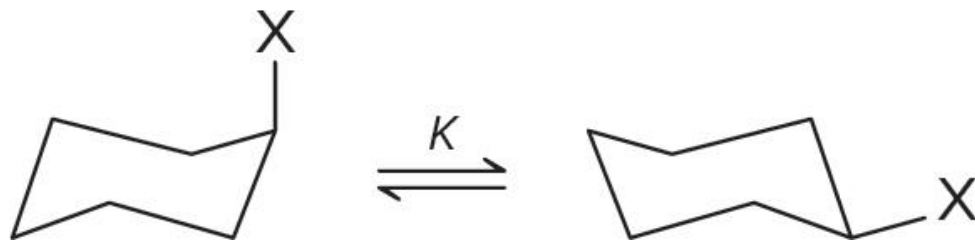
Όσο μεγαλύτερος ο υποκαταστάτης τόσο μεγαλύτερες οι 1,3-διαξονικές αλληλεπιδράσεις, οπότε η ενεργειακή διαφορά του ισημερινού από το αξονικό διαμορφομερές καθίσταται μεγαλύτερη.



Μία ομάδα *τριτ*-βουτυλο, είναι πολύ πιο ογκώδης από μία μεθυλομάδα, επομένως η **ισορροπία μετατοπίζεται ακόμη περισσότερο προς το πιο σταθερό ανάκλιντρο** (δηλ, με τον πιο ογκώδη υποκαταστάτη σε ισημερινή θέση), με αποτέλεσμα να είναι το ποσοστό των μορίων που υιοθετούν το συγκριμένο διαμορφομερές ακόμη μεγαλύτερο (>99,99%).

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο



Όσο αυξάνεται η τιμή της σταθεράς ισορροπίας K , τόσο πιο αρνητική γίνεται η ενέργεια Gibbs (ΔG°), τόσο **μικρότερο** είναι το ποσοστό αξονικής διαμόρφωσης.

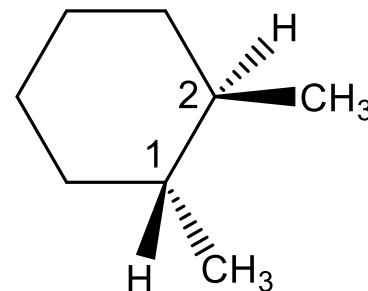
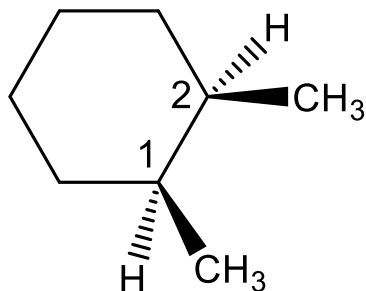
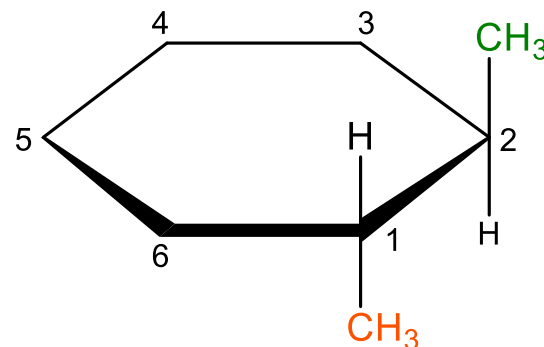
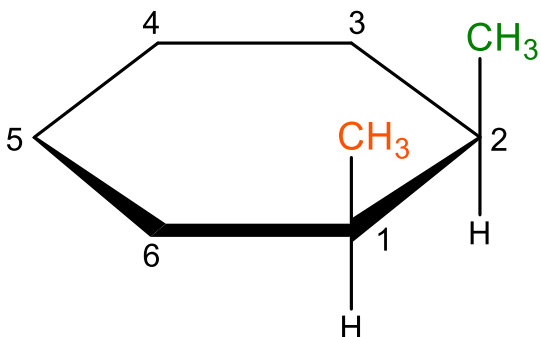
Υποκαταστάτης X	Ποσοστό αξονικής διαμόρφωσης	Ποσοστό ισημερινής διαμόρφωσης	K	ΔG° (στους 298 K)	
				kJ/mol	Kcal/mol
-CH ₃	5	95	19	-7,2	-1,74
-CH ₂ CH ₃	4,6	95,4	21	-7,5	-1,79
-CH(CH ₃) ₂	3	97	38	-9,0	-2,15
-C(CH ₃) ₃	<0,01	>99,99	>9999	-22,8	-5,5
-F	40	60	1,5	-1,0	-0,25
-Cl	29	71	2,4	-2,2	-0,52
-OH	17	83	4,8	-3,9	-0,93
-NH ₂	9	91	11	-5,9	-1,4

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Διαμορφώσεις 1,2-διυποκατεστημένων κυκλοεξανίων

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ - ΑΝΑΛΥΣΗ



cis-1,2-διμεθυλοκυκλοεξάνιο

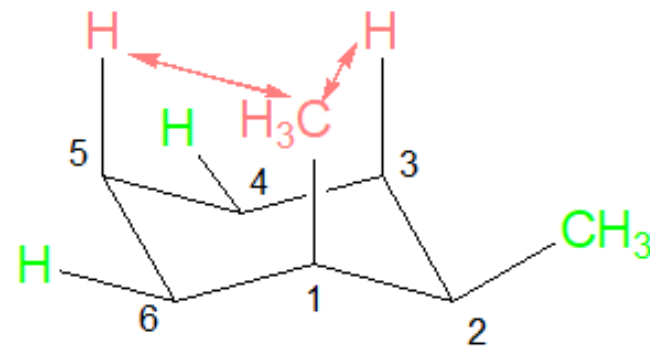
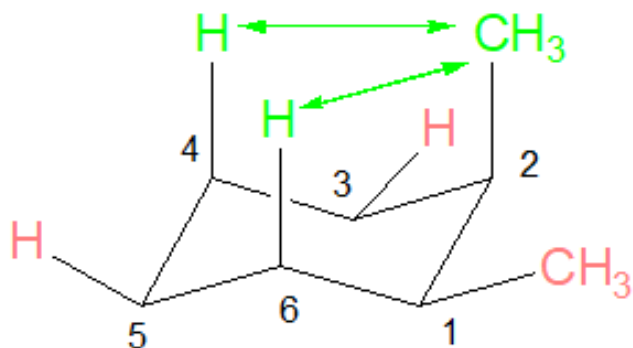
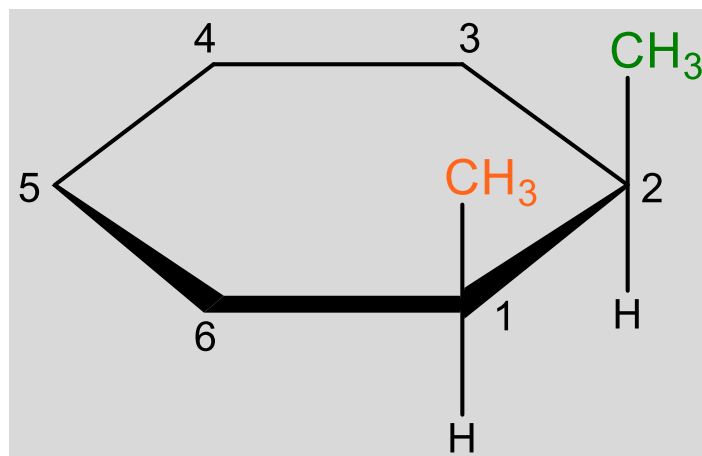
trans-1,2-διμεθυλοκυκλοεξάνιο

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Διαμορφώσεις *cis*-1,2-διυποκατεστημένων κυκλοεξανίων

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ - ΑΝΑΛΥΣΗ



cis-1,2-διμεθυλοκυκλοεξάνιο

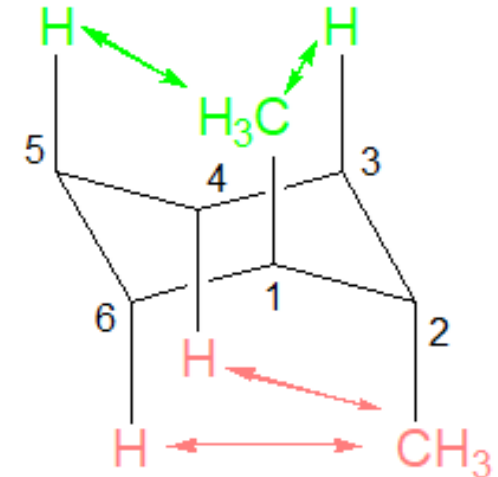
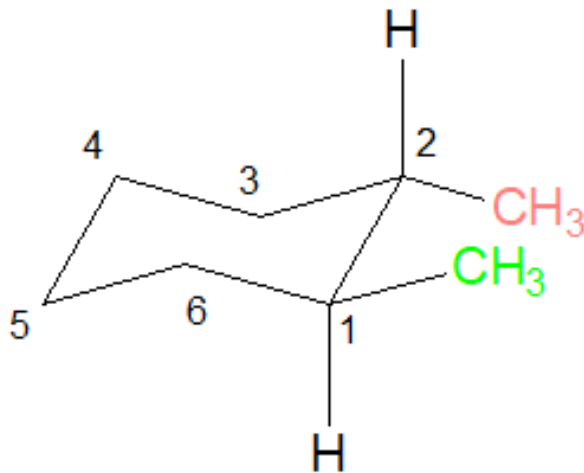
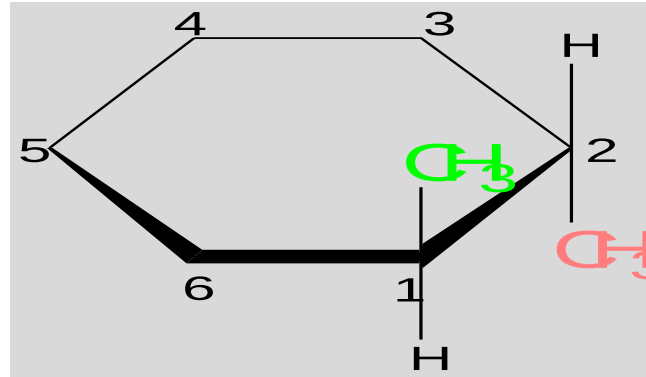
Υπάρχουν **εξίσου** 1,3-διαξονικές αλληλεπιδράσεις και στα δύο διαμορφωμερή ανάνκλιτρου.

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Διαμορφώσεις *trans*-1,2-διυποκατεστημένων κυκλοεξανίων

ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ - ΑΝΑΛΥΣΗ



μιδέν 1,3-διαξονικές
αλληλεπιδράσεις

trans-1,2-διμεθυλοκυκλοεξάνιο

(x4) 1,3-διαξονικές
αλληλεπιδράσεις

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξανίο

Εφαρμόζοντας τους ίδιους κανόνες που εφαρμόσαμε για την ανάλυση των διαμορφώσεων του 1,2-διμεθυλοκυκλοεξανίου μπορούμε να αναλύσουμε τη διαμόρφωση κάθε υποκατεστημένου κυκλοεξανίου.

Γενικοί κανόνες:

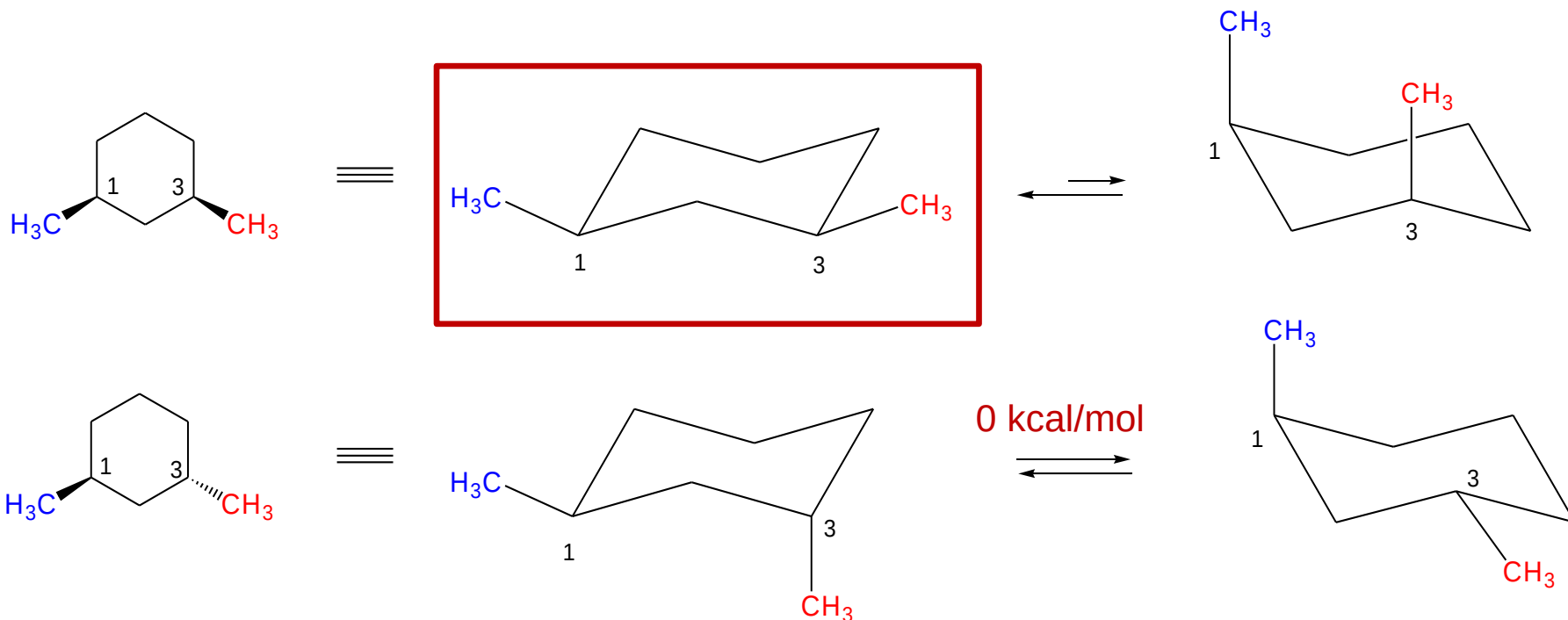
- Οι 1,3-διαξονικές αλληλεπιδράσεις είναι σημαντικές και πρέπει να λαμβάνονται υπόψη.
- Ογκώδεις υποκαταστάτες τείνουν να μετατοπίζουν την ισορροπία προς την μεριά όπου ο ογκώδης υποκαταστάτης βρίσκεται σε ισημερινή θέση.

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στεreoχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.

(a)

cis-1,3-διμεθυλοκυκλοεξάνιο και *trans*-1,3-διμεθυλοκυκλοεξάνιο



cis: 2 ισημερινοί ή 2 αξονικοί υποκαταστάτες

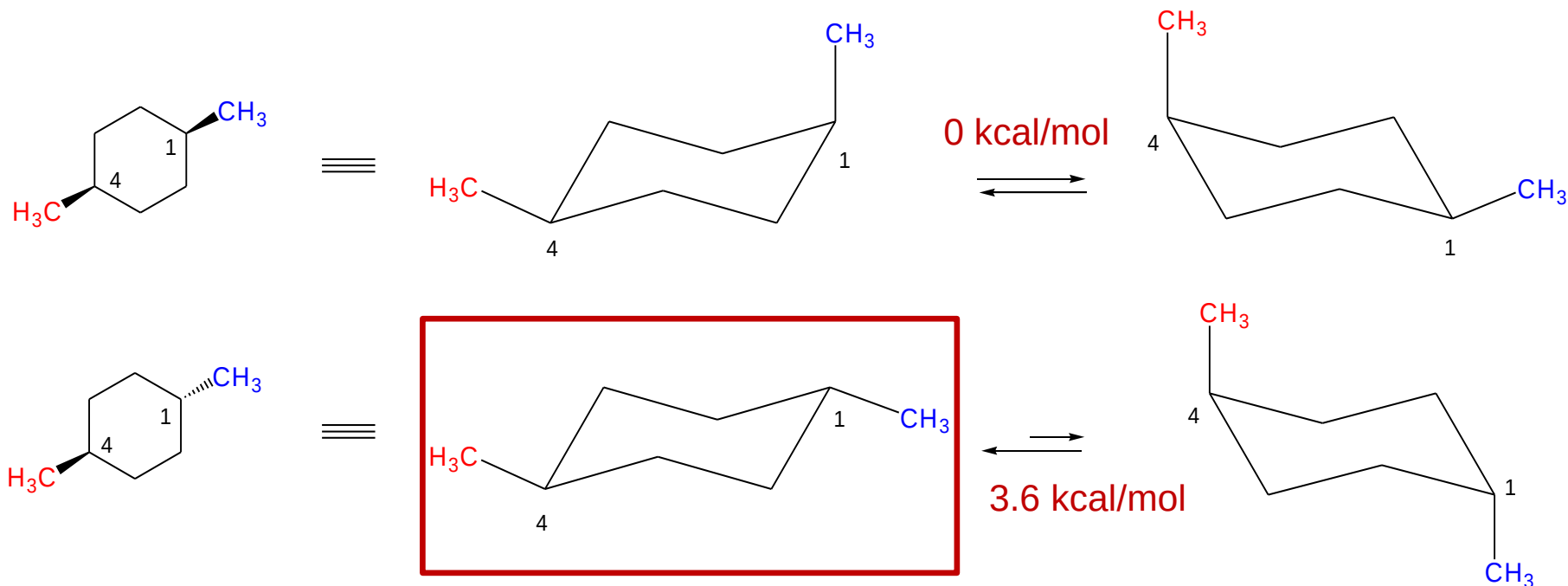
trans: 1 ισημερινός και 1 αξονικός υποκαταστάτης

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στεreoχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.

(b)

cis-1,4-διμεθυλοκυκλοεξάνιο και *trans*-1,4-διμεθυλοκυκλοεξάνιο

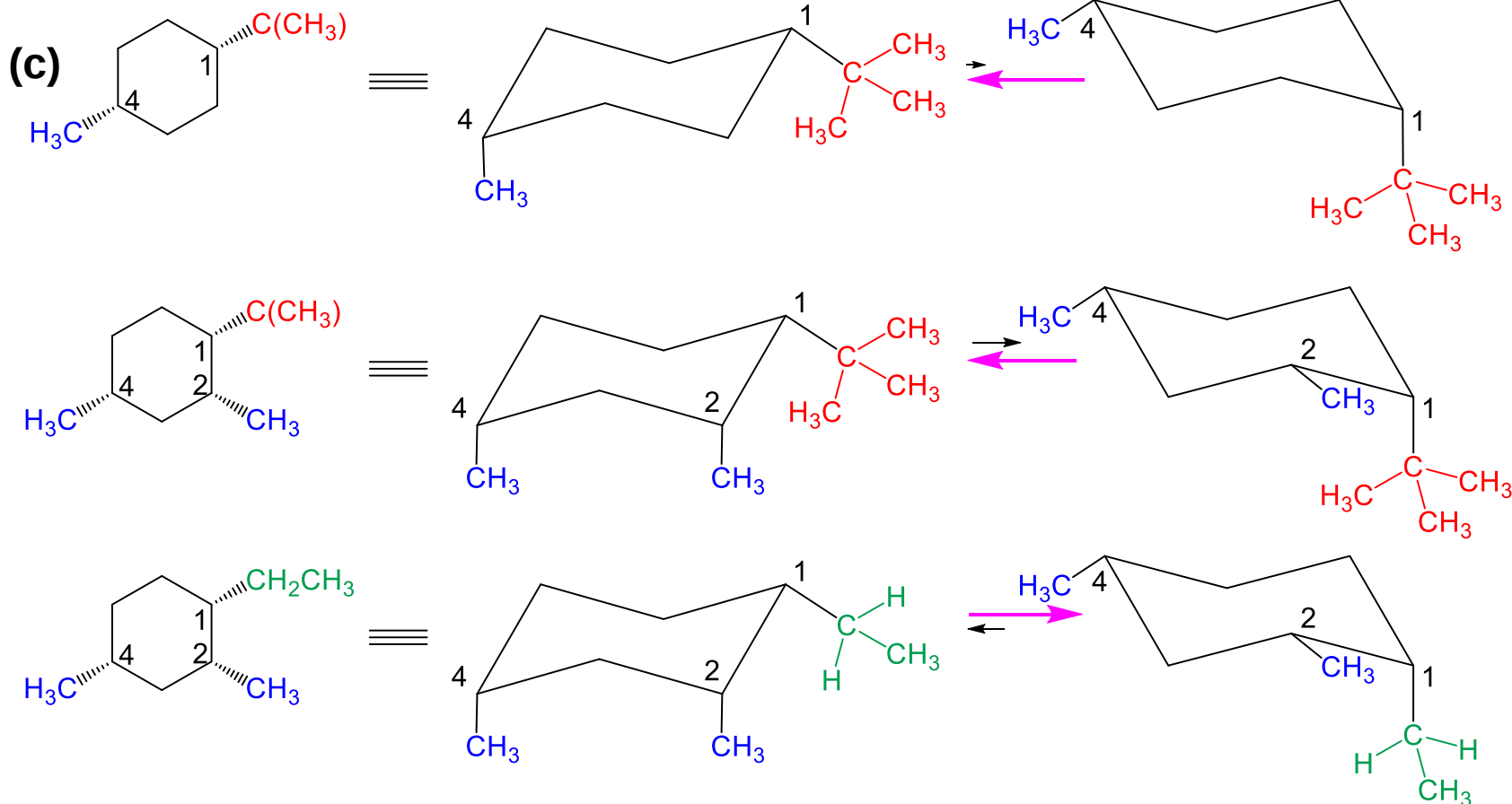


cis: 1 ισημερινός και 1 αξονικός υποκαταστάτης

trans: 2 ισημερινοί ή 2 αξονικοί υποκαταστάτες

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στεreoχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.



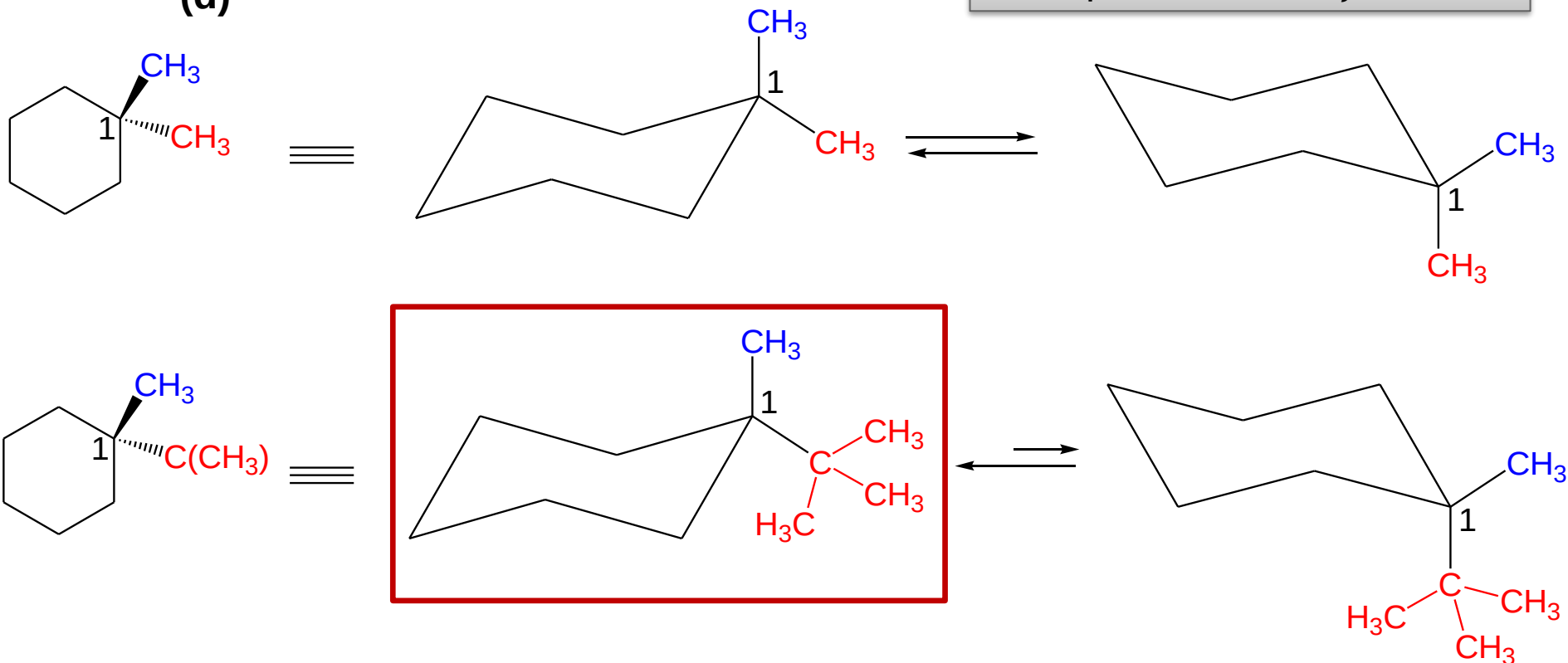
Όταν υπάρχουν περισσότεροι από δύο υποκαταστάτες, η σταθερότερη διαμόρφωση θα είναι αυτή που τοποθετεί τον μεγαλύτερο αριθμό ομάδων σε ισημερινές θέσεις. Ωστόσο, η περίπτωση του *τριτ*-βουτίλου αποτελεί εξαίρεση, το *τριτ*-βουτύλο πάντα «κυβερνά».

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στεreoχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.

1,1-διμεθυλοκυκλοεξάνιο

(d)

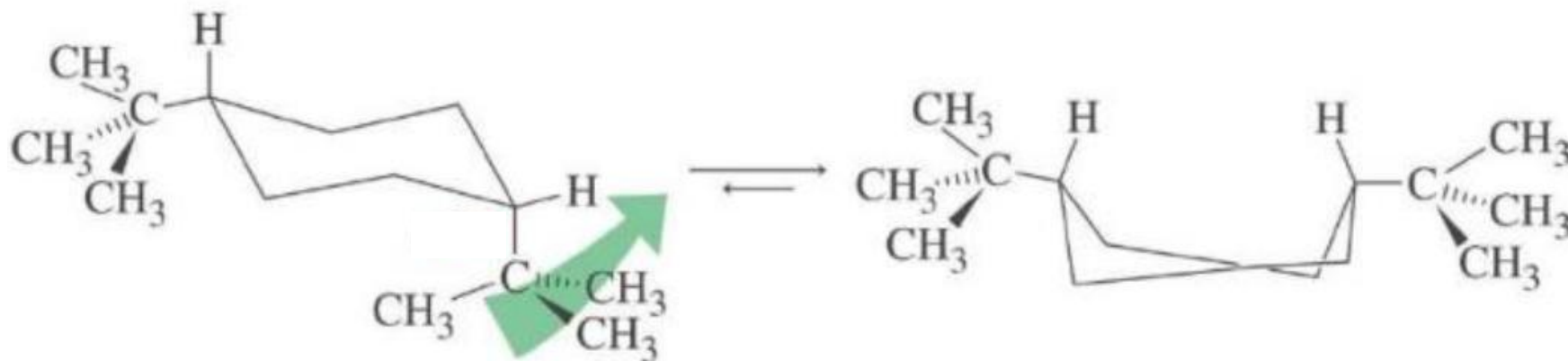


1 ισημερινός και 1 αξονικός υποκαταστάτης

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στεreoχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.

(e)



(*t*-Bu)

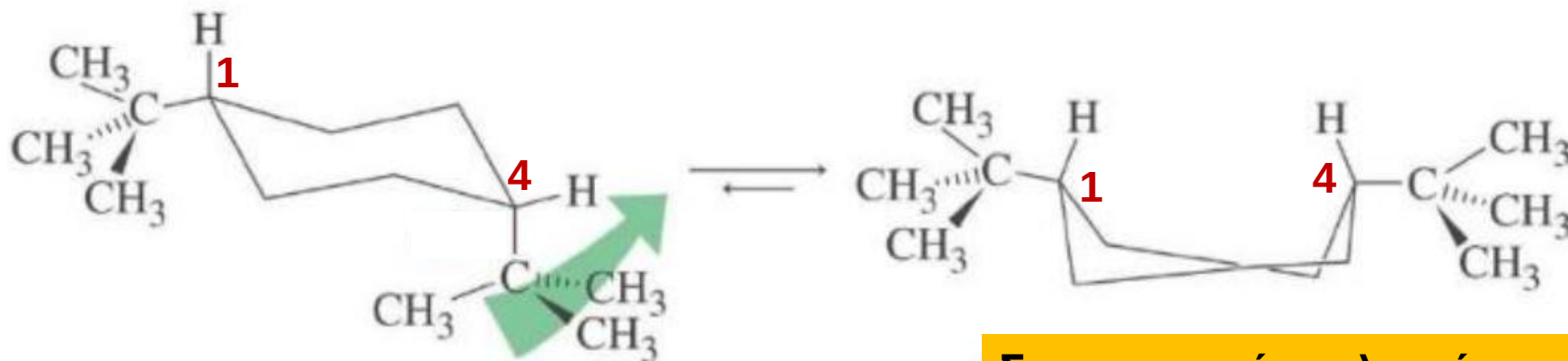
1 ισημερινός

1 αξονικός

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στερεοχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.

(e)



Συνεστραμμένος λουτήρας

εξαίρεση

όταν οι δύο υποκαταστάτες (C1,C4) είναι πολύ ογκώδεις ...

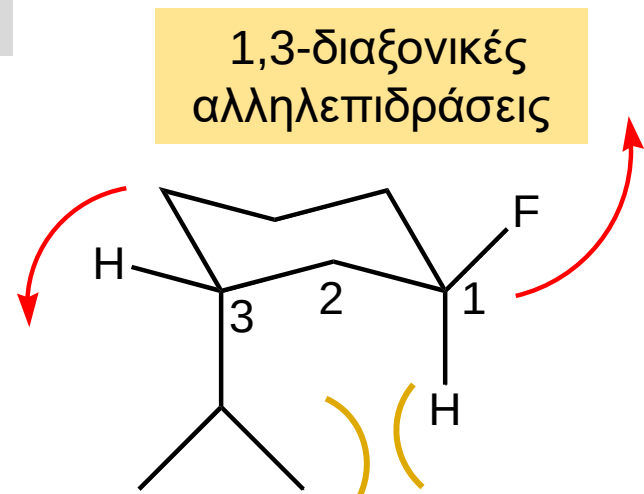
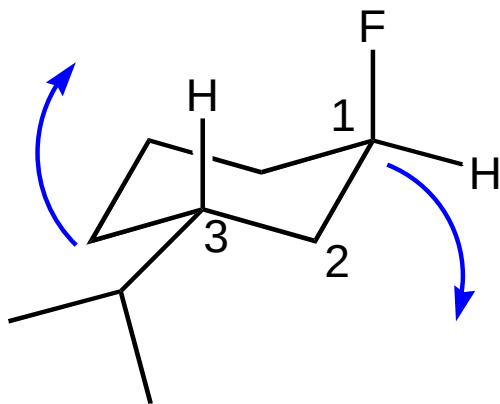
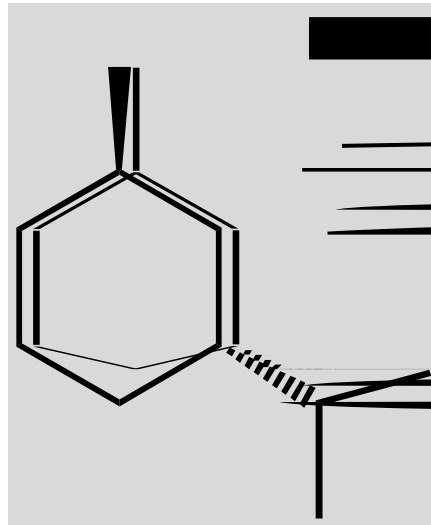
Σταθερότερη
διαμόρφωση

Και οι δύο *t*-Bu-ομάδες είναι σε **ψευδοισημερινές θέσεις**

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στεreoχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.

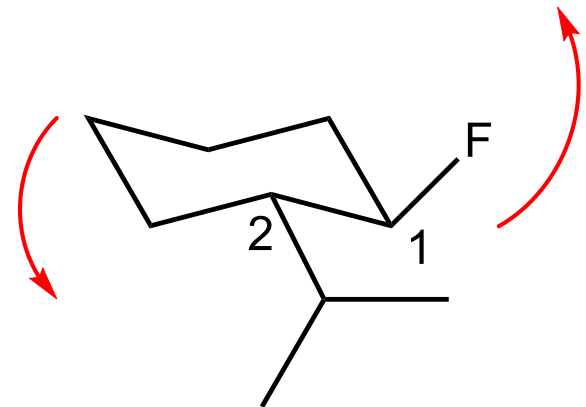
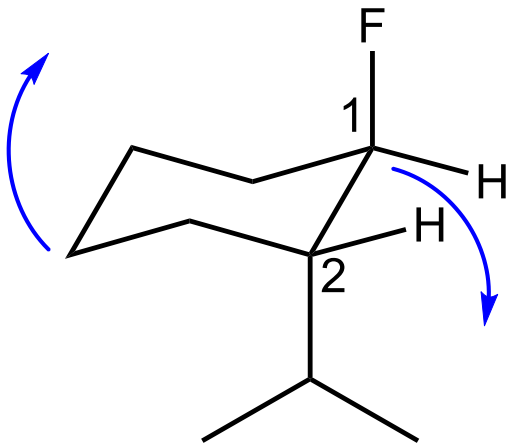
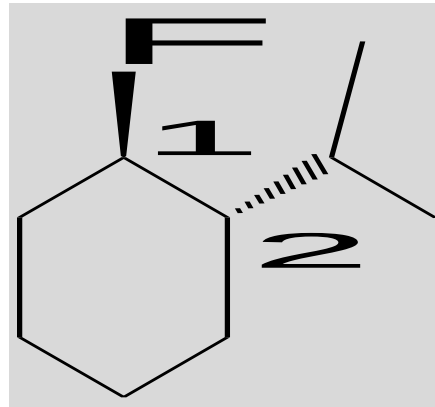
(f)



Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

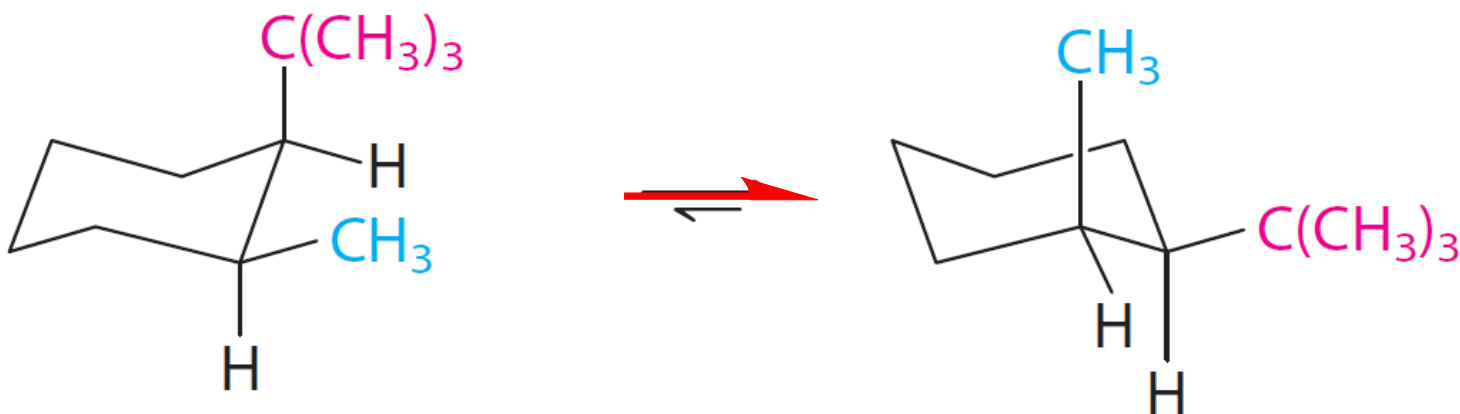
Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στεreoχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.

(g)



Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.3: Σχεδιάστε τις δύο διαμορφώσεις ανάκλιντρου του *cis*-1-*tert*-βουτυλο-2-μεθυλοκυκλοεξανίου και υποδείξτε τη σχετική τους σταθερότητα, εξηγώντας την επιλογή σας.



(Ασταθέστερη διαμόρφωση: ο ογκώδης υποκαταστάτης είναι αξονικός)

(Σταθερότερη διαμόρφωση: ο ογκώδης υποκαταστάτης είναι ισημερινός)

cis-1-*tert*-βουτυλο-2-μεθυλοκυκλοεξάνιο

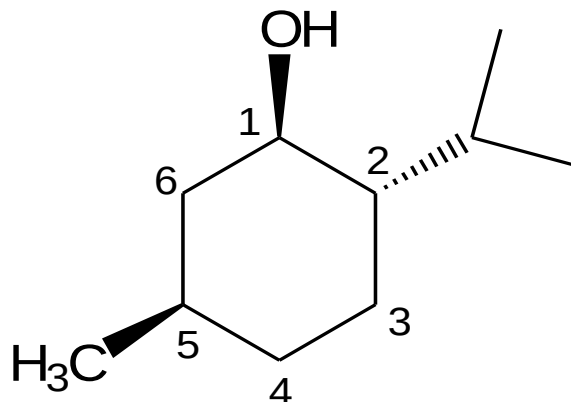
1,3-διαξονικές
αλληλεπιδράσεις

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.4: ejer que iba a poner en el examen.....con Energías....

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Άσκηση 3.1: Σχεδιάστε τις δύο πιθανές δομές ανακλίντρου της παρακάτω ένωσης. Ποια διαμόρφωση είναι σταθερότερη;



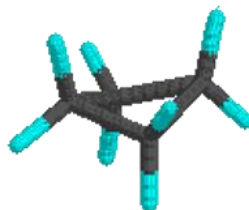
Άσκηση 3.2: Σχεδιάστε το διάγραμμα αναμενόμενης δυναμικής ενέργειας για την περιστροφή γύρω από τον απλό δεσμό C-C που υποδεικνύεται στα ακόλουθα μόρια.

(a) C(2)-C(3) στο 2,3-διμεθυλοβουτάνιο

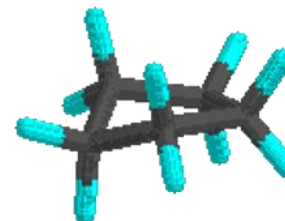
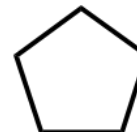
(b) C(3)-C(4) στο 2,2,4-τριμεθυλοπεντάνιο



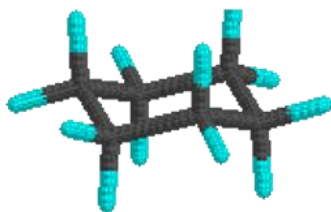
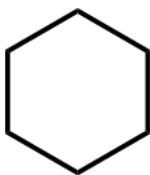
Cyclopropane
Avg Bond Angle = 60°
Strain Energy = 114.2 kJ/mol



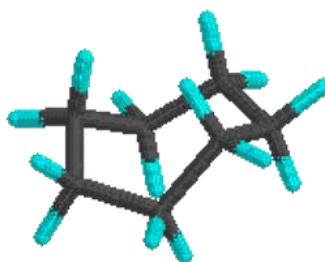
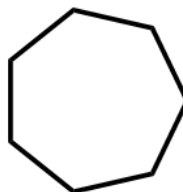
Cyclobutane
Avg Bond Angle = 90°
Strain Energy = 110.9 kJ/mol



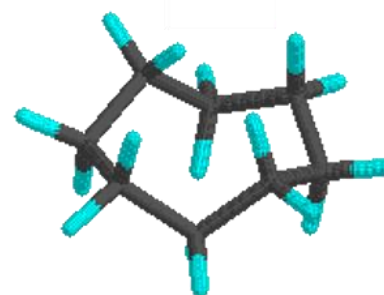
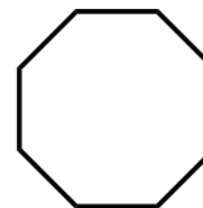
Cyclopentane
Avg Bond Angle = 108°
Strain Energy = 25.9 kJ/mol



Cyclohexane
Avg Bond Angle = 109.5°
Strain Energy = 0 kJ/mol



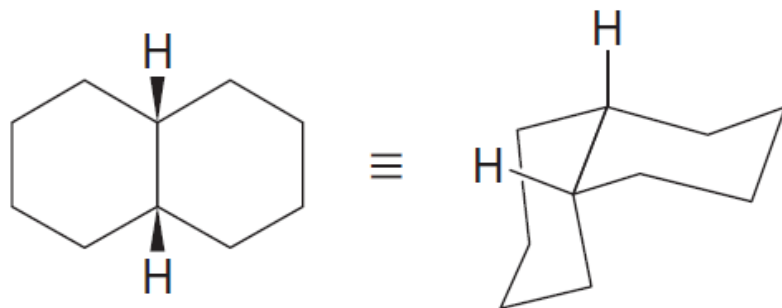
Cycloheptane
Avg Bond Angle = 129°
Strain Energy = 25.9 kJ/mol



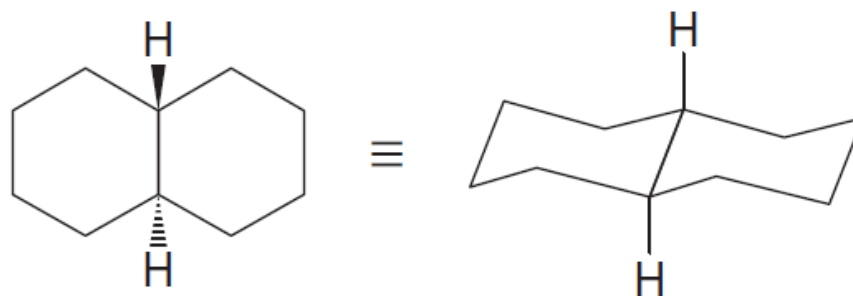
Cyclooctane
Avg Bond Angle = 135°
Strain Energy = 40.6 kJ/mol

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

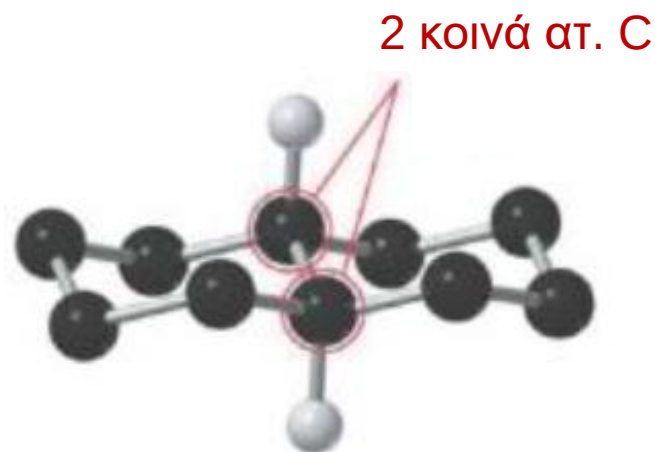
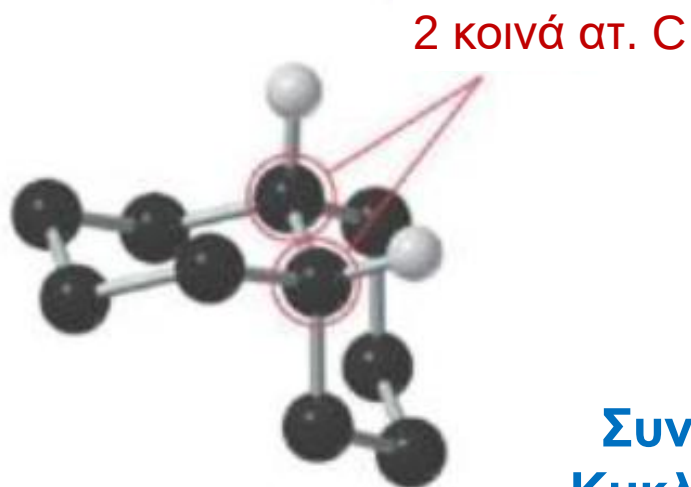
Διαμορφωμερή δικυκλικών ενώσεων



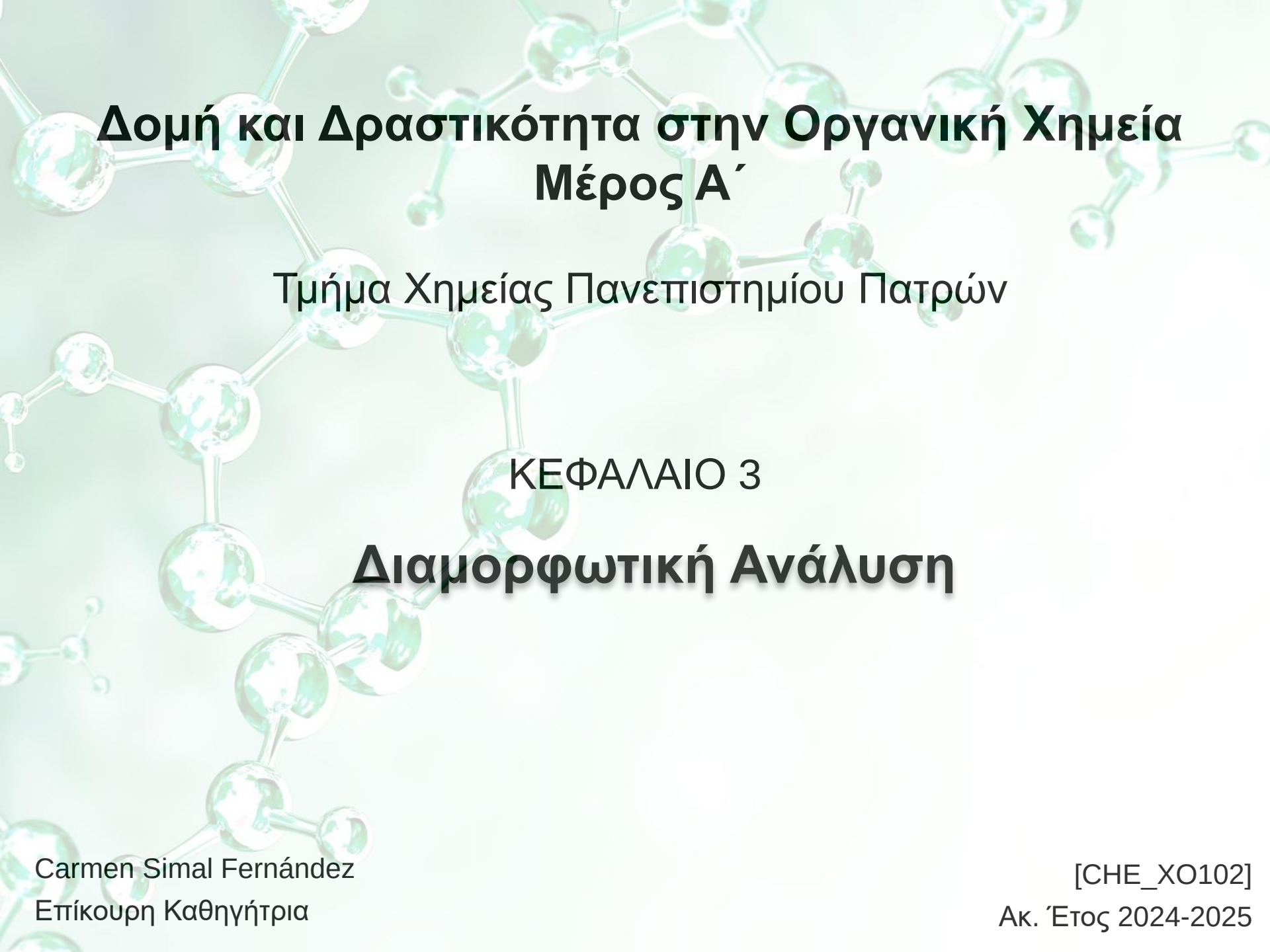
cis-δικυκλο[4.4.0]δεκάνιο
(*cis*-δεκαλίνη)



trans-δικυκλο[4.4.0]δεκάνιο
(*trans*-δεκαλίνη)



Συντηγμένα
Κυκλοαλκάνια

A faint, light green molecular structure is visible in the background, consisting of interconnected spheres and rods, resembling a polymer or a complex organic molecule.

Δομή και Δραστικότητα στην Οργανική Χημεία

Μέρος Α΄

Τμήμα Χημείας Πανεπιστημίου Πατρών

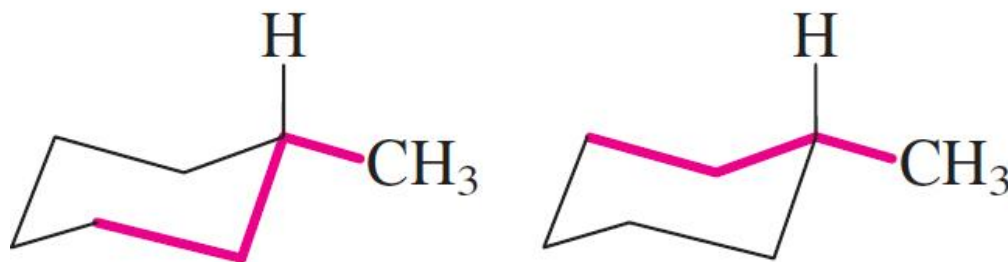
ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3

Διαμορφωτική Ανάλυση

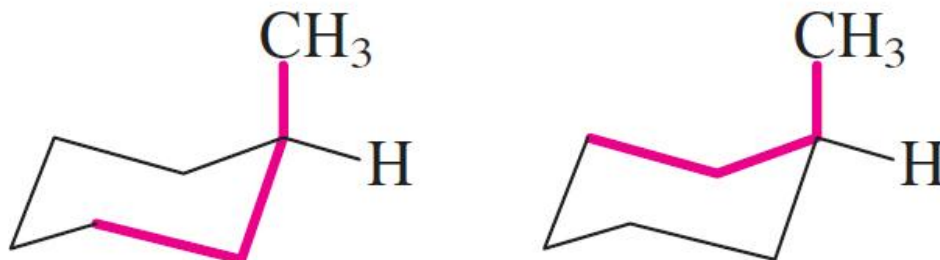
Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Μπορούμε να συσχετίσουμε τη διαμορφωτική προτίμηση μιας ισημερινής μεθυλομάδας στο μεθυλοκυκλοεξάνιο με τη διαμόρφωση του βουτανίου. Οι παρακάτω συντακτικοί τύποι παρουσιάζουν με κόκκινο την κοινή αλυσίδα μεταξύ μεθυλοκυκλοεξανίου και βουτανίου, έτσι ώστε να συμπεριλαμβάνεται η μεθυλομάδα. Στο πρώτο ζευγάρι δομών, η διάταξη που αναδεικνύει το κάθε κόκκινο ίχνος προσομοιάζει την *άντι* διάταξη του βουτανίου.



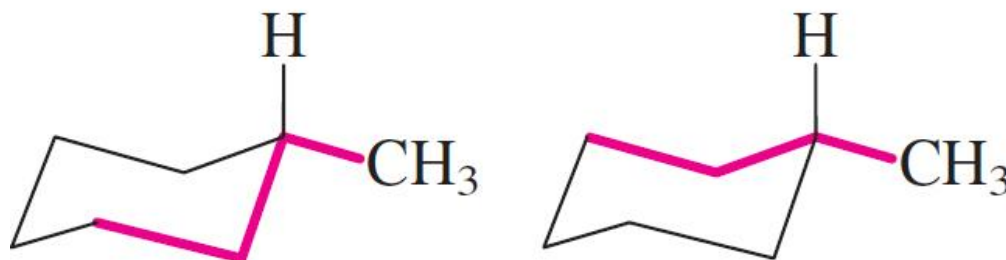
Όταν η μεθυλομάδα βρίσκεται σε αξονική θέση, το κάθε κόκκινο ίχνος προσομοιάζει τη *συγκλινή* διάταξη του βουτανίου.



Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

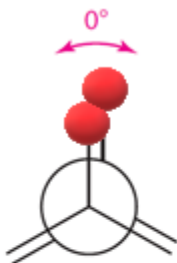
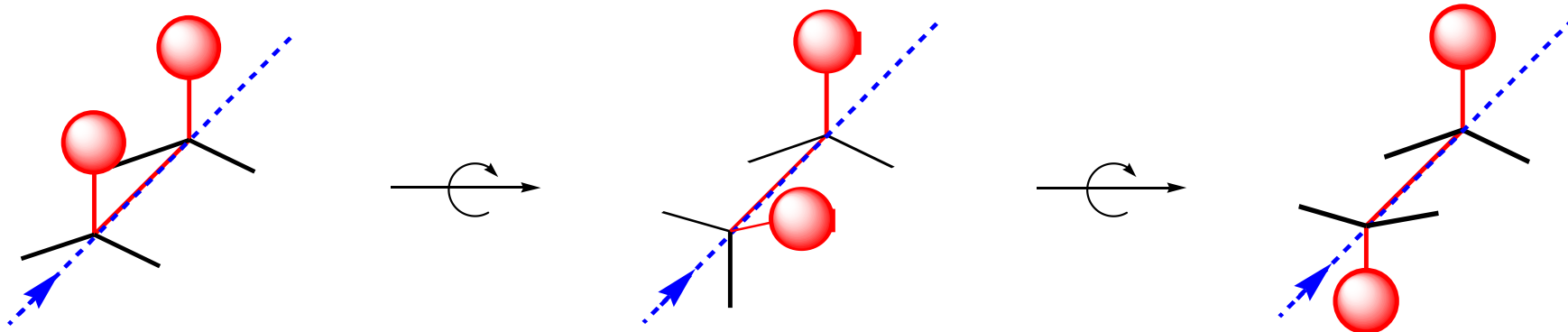
Μπορούμε να συσχετίσουμε τη διαμορφωτική προτίμηση μιας ισημερινής μεθυλομάδας στο μεθυλοκυκλοεξάνιο με τη διαμόρφωση του βουτανίου. Οι παρακάτω συντακτικοί τύποι παρουσιάζουν με κόκκινο την κοινή αλυσίδα μεταξύ μεθυλοκυκλοεξανίου και βουτανίου, έτσι ώστε να συμπεριλαμβάνεται η μεθυλομάδα. Στο πρώτο ζευγάρι δομών, η διάταξη που αναδεικνύει το κάθε κόκκινο ίχνος προσομοιάζει την *άντι* διάταξη του βουτανίου.



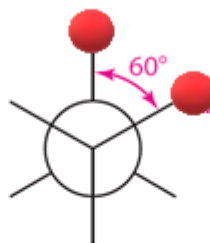
- Η προτίμηση της ισημερινής μεθυλομάδας στο μεθυλοκυκλοεξάνιο είναι ανάλογη με την προτίμηση της *αντι*-διάταξης του βουτανίου (*αντι*- 3.8 KJ/mol σταθερότερη από την *συγκλινή* διαμόρφωση).
- Οι ίδιοι παράγοντες που καθορίσουν τις διαμορφώσεις στα μη κυκλικά μόρια καθορίσουν και τις διαμορφώσεις στα κυκλικά.
- Οι 1,3-διαξονικές απώσεις στα υποκαταστήμενα κυκλοεξάνια ισοδυναμούν με την στεreoχημική τάση των συγκλινών διατάξεων των αλκανίων.

Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

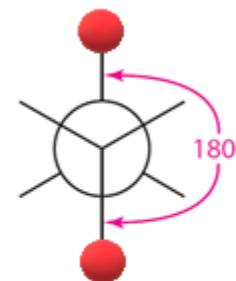
Εκλειπτική vs Διαβαθμισμένης διαμόρφωσης



Γωνία στρέψης = 0°
Εκλειπτική



Γωνία στρέψης = 60°
Συγκλινής



Γωνία στρέψης = 180°
Άντι

Διαβαθμισμένες

Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Η αντιδράσεις οξείδωσης των υδρογονοανθράκων είναι εξώθερμες αντιδράσεις → Δηλαδή έχουν $\Delta H^\circ < 0$ και εκλύεται ενέργεια

Θερμότητες καύσης ($-\Delta H^\circ$) των κυκλοαλκανίων

Θερμότητα Καύσης

Θερμότητα καύσης
ανά μεθυλομάδα

Κυκλοαλκάνιο	Αριθμός μεθυλομάδων	kJ/mol	kcal/mol	kJ/mol	kcal/mol
Κυκλοπροπάνιο	3	2.091	499,8	697	166,6
Κυκλοβουτάνιο	4	2.745	656,1	686	164,0
Κυκλοπεντάνιο	5	3.320	793,4	664	158,7
Κυκλοεξάνιο	6	3.953	944,7	659	157,5
Κυκλοεπτάνιο	7	4.637	1108,4	662	158,3
Κυκλοοκτάνιο	8	5.310	1269,2	664	158,7
Κυκλοεννεάνιο	9	5.981	1429,6	665	158,8
Κυκλοδεκάνιο	10	6.639	1587,8	664	158,7
Κυκλοεντεκάνιο	11	7.293	1743,2	663	158,5
Κυκλοδωδεκάνιο	12	7.992	1893,4	660	157,8
Κυκλοδεκατεσσσεράνιο	14	9.234	2207,0	660	157,6
Κυκλοδεκαεξάνιο	16	10.548	2521,0	659	157,6

PROYECCIONES DE NEWMAN



—— Izquierda
..... Derecha

Proyección de cuñas a Newman



Sonia Ag

1.96K subscribers

Subscribed

Like

Dislike

Share

Download

More

1.7K views 8 months ago

YouTube video player interface showing a list of recommended videos:

- From Sonia Ag**
 - Organic Chemistry**
 - Re**
- Ena ταξίδι με τις 4 ομάδες που ξεκίνησε και συνεχίζεται...**
 - COSMOTV
 - 86K views
 - Sponsored
- Proyección de Newman, Fischer y caballete**
 - Germán Fernández
 - 53K views • 3 years ago
- Pasar de proyección de Newman a Fischer y caballete.**
 - Germán Fernández
 - 53K views • 3 years ago
- LA QUÍMICA ORGÁNICA EN PROBLEMAS. 9-NOTACIÓN R-S**
 - Germán Fernández
 - 123K views • 7 years ago
- JT Presentación Documento**
 - Ruinas prácticas para el
- PROYECCIÓN DE FIS**
- PROYECCIÓN DE FIS**
- PROYECCIÓN DE FIS**

Snipping Tool

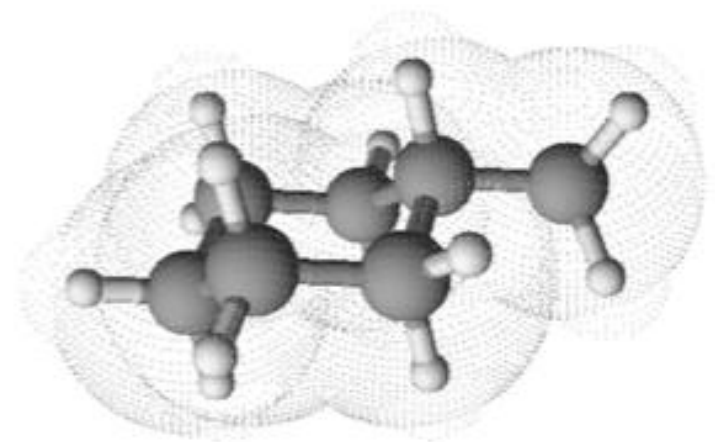
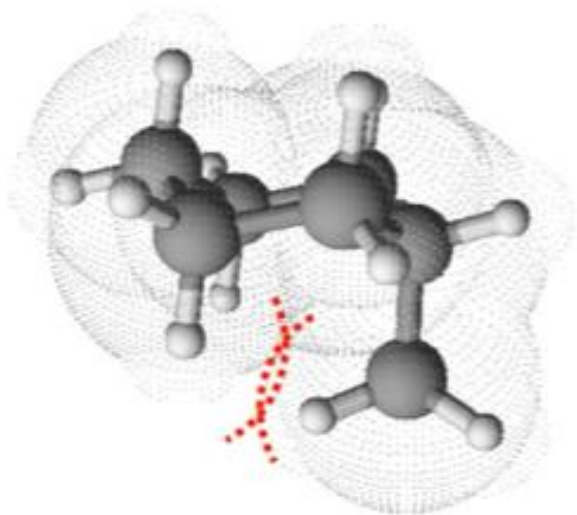
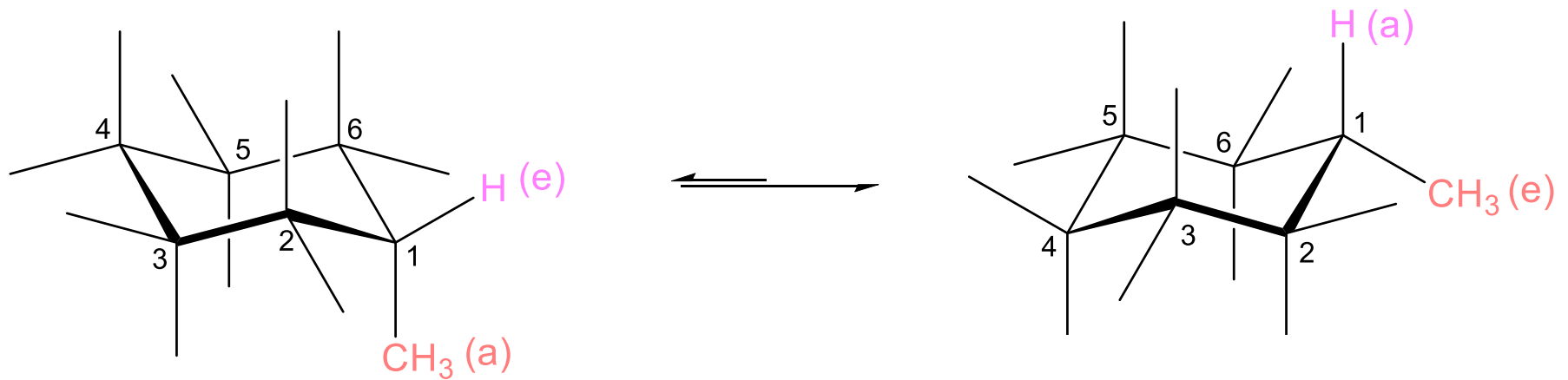
Screenshot copied to clipboard and saved

Select here to mark up and share the image

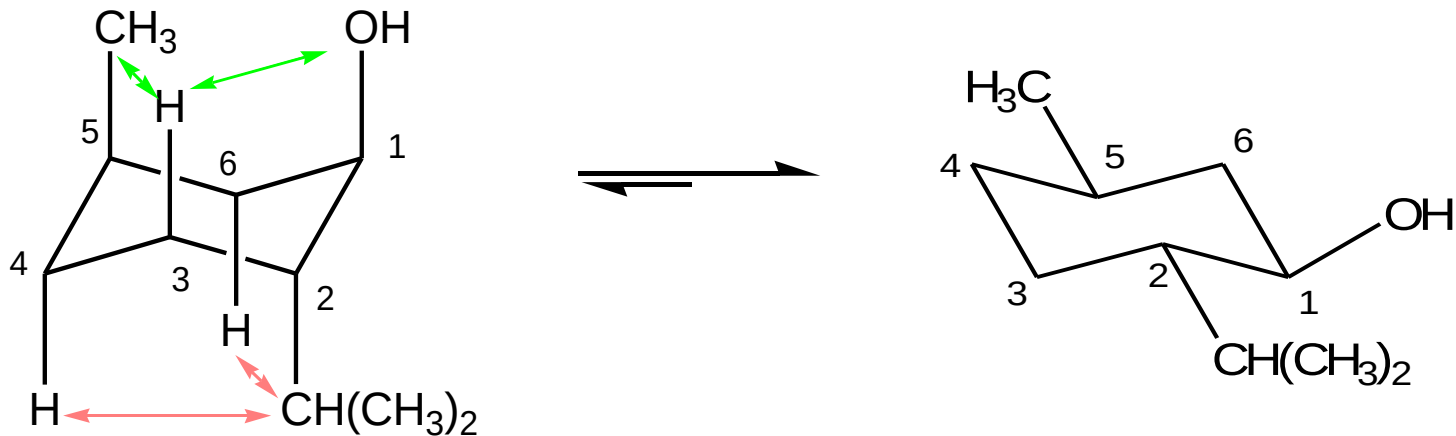
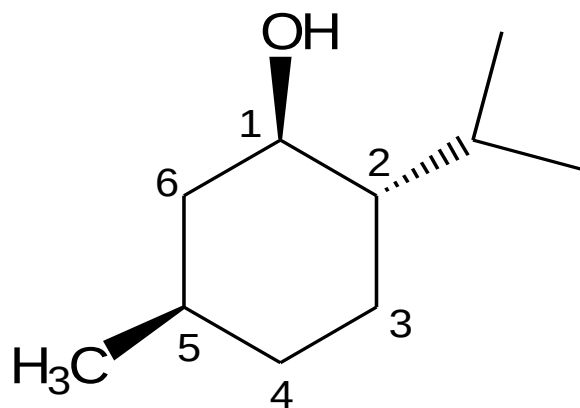
Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο

Διαμορφώσεις μονοϋποκατεστημένων κυκλοεξανίων



Άσκηση: Σχεδιάστε τις δύο πιθανές δομές ανακλίντρου της παρακάτω ένωσης. Ποια διαμόρφωση είναι σταθερότερη;



$$\Delta G^{\circ} = G^{\circ}_{\text{προϊόντα}} - G^{\circ}_{\text{αντιδρώντα}} = -RT \ln K$$

$$\Delta G^{\circ} = \Delta H^{\circ} - T\Delta S^{\circ}$$



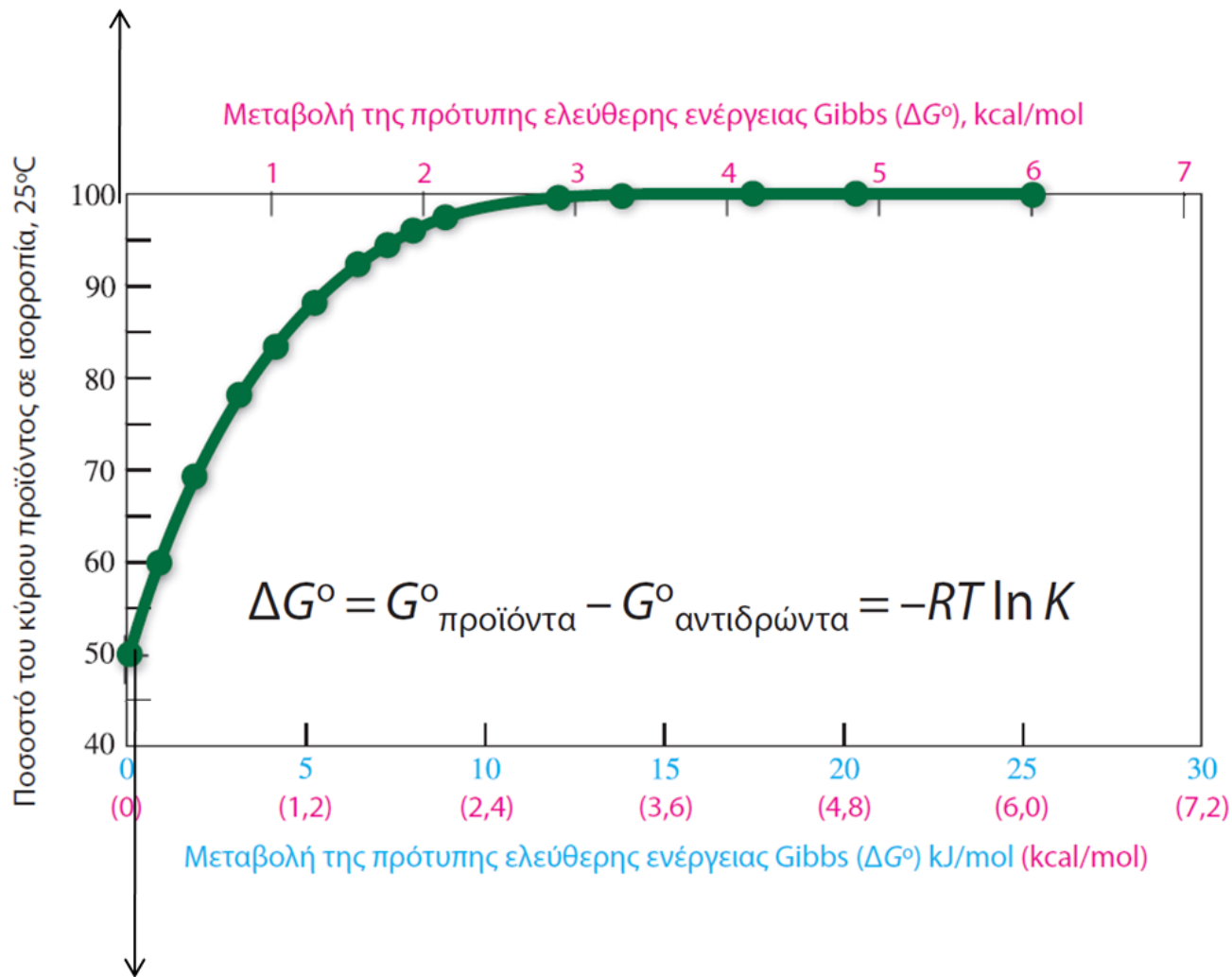
Υποκαταστάτης X	Ποσοστό αξονικής διαμόρφωσης	Ποσοστό ισημερινής διαμόρφωσης	K	ΔG° (στους 298 K)	
				kJ/mol	Kcal/mol
-CH ₃	5	95	19	-7,2	-1,74
-CH ₂ CH ₃	4,6	95,4	21	-7,5	-1,79
-CH(CH ₃) ₂	3	97	38	-9,0	-2,15
-C(CH ₃) ₃	<0,01	>99,99	32	-22,8	-5,5
-F	40	60	1,5	-1,0	-0,25
-Cl	29	71	2,4	-2,2	-0,52
-OH	17	83	4,8	-3,9	-0,93
-NH ₂	9	91	11	-5,9	-1,4

Τι υποδεικνύει το αρνητικό πρόσημο της ΔG° ?

αντιδρώντα / προϊόντα = 0,01% / 99,99%

Άρα: $K = 9.999 \rightarrow \ln 9.999 = 9.21$

Άρα: $\Delta G^\circ \ll 0 \rightarrow G^\circ \text{ αντιδρώντα} \gg G^\circ \text{ προϊόντα}$



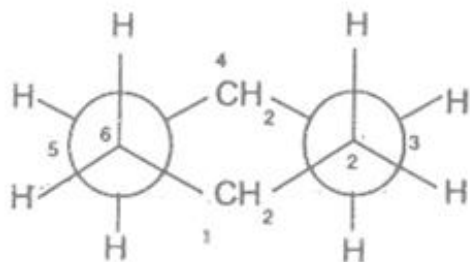
αντιδρώντα / προϊόντα = 50% / 50%

Άρα: $K = 1 \rightarrow \ln 1 = 0$

Άρα: $\Delta G^\circ = 0 \rightarrow G^\circ \text{ προϊόντα} = G^\circ \text{ αντιδρώντα}$

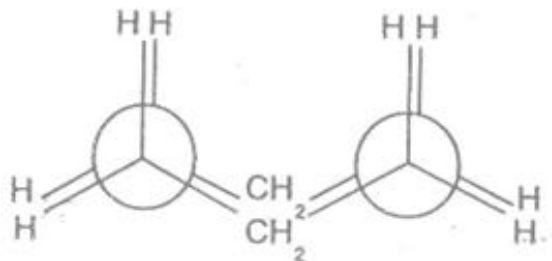
Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

κυκλοεξάνιο



καρέκλα **Ανάκλήτρο**

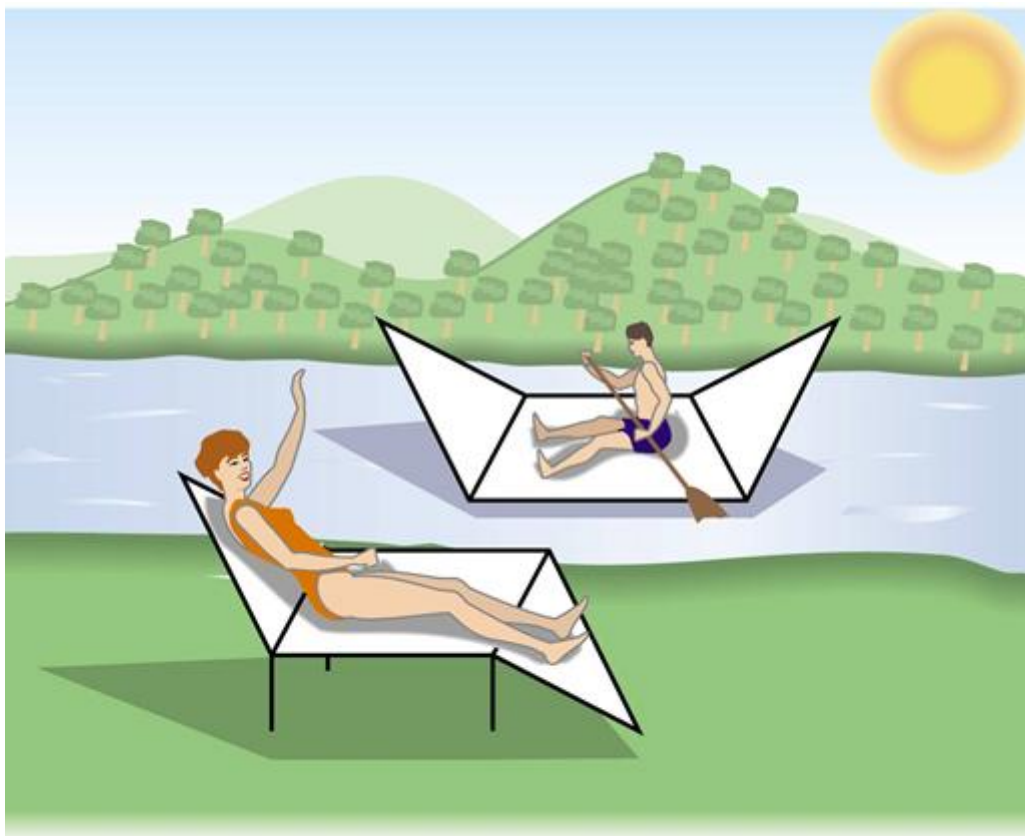
Τάση δακτυλίου = $0.0 \text{ Kcal mol}^{-1}$



βάρκα **Λουτήρας**

Τάση δακτυλίου = $7.1 \text{ Kcal mol}^{-1}$

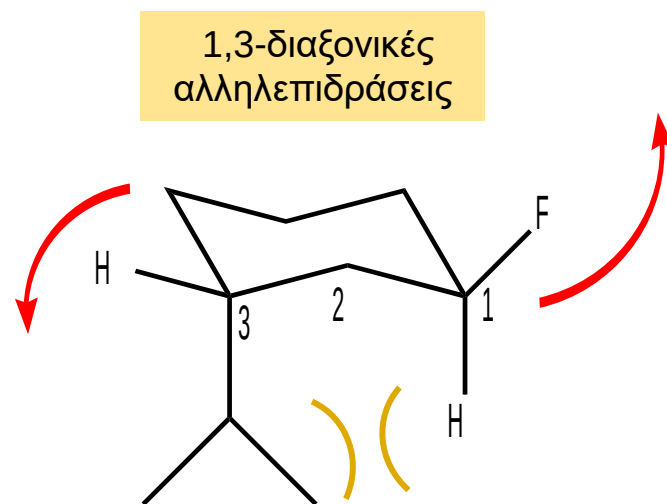
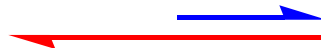
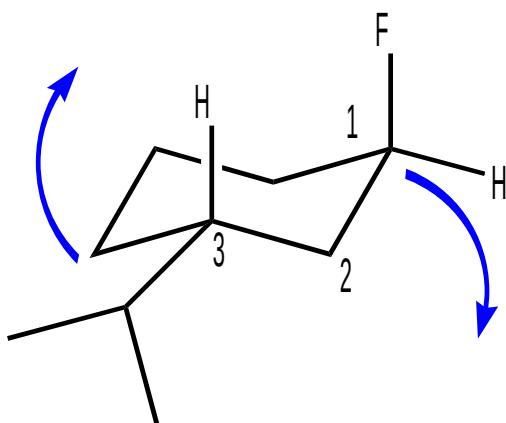
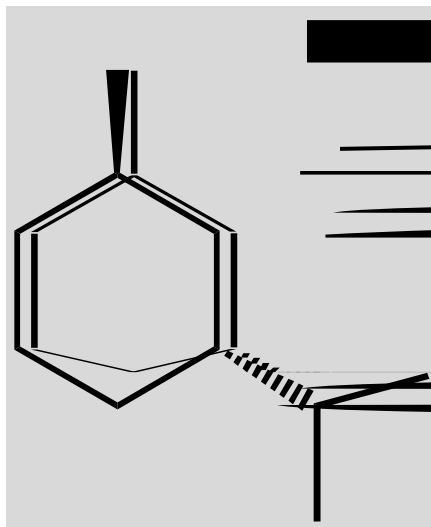
Προβολή Newman
μη υποκατεστημένου κυκλοεξανίου

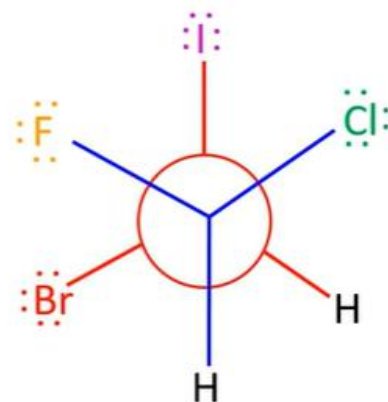
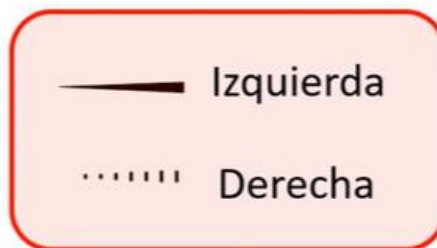
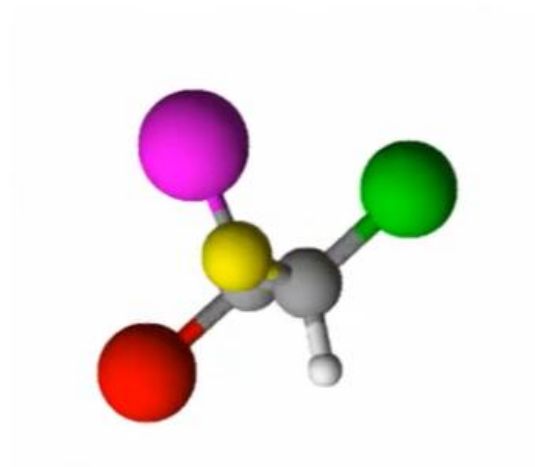
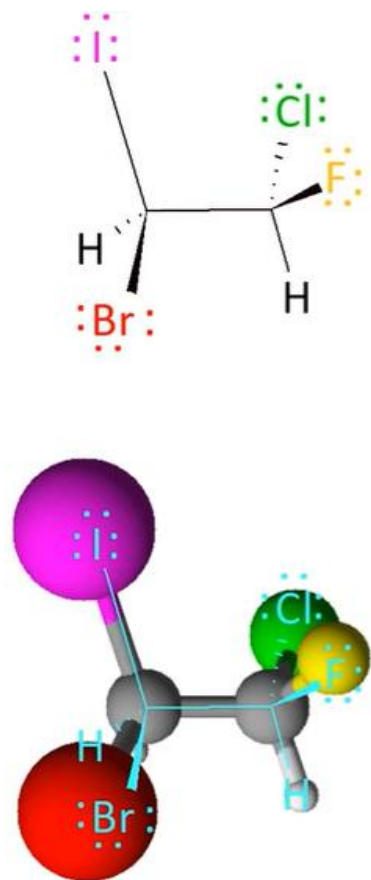


Κυκλοαλκάνια. Διαμορφωμερή

Παράδειγμα 3.2: Να σχεδιαστεί η μετατροπή στεreoχημικής δομής υποκατεστημένου κυκλοεξανίου σε δομή ανακλίντρου.

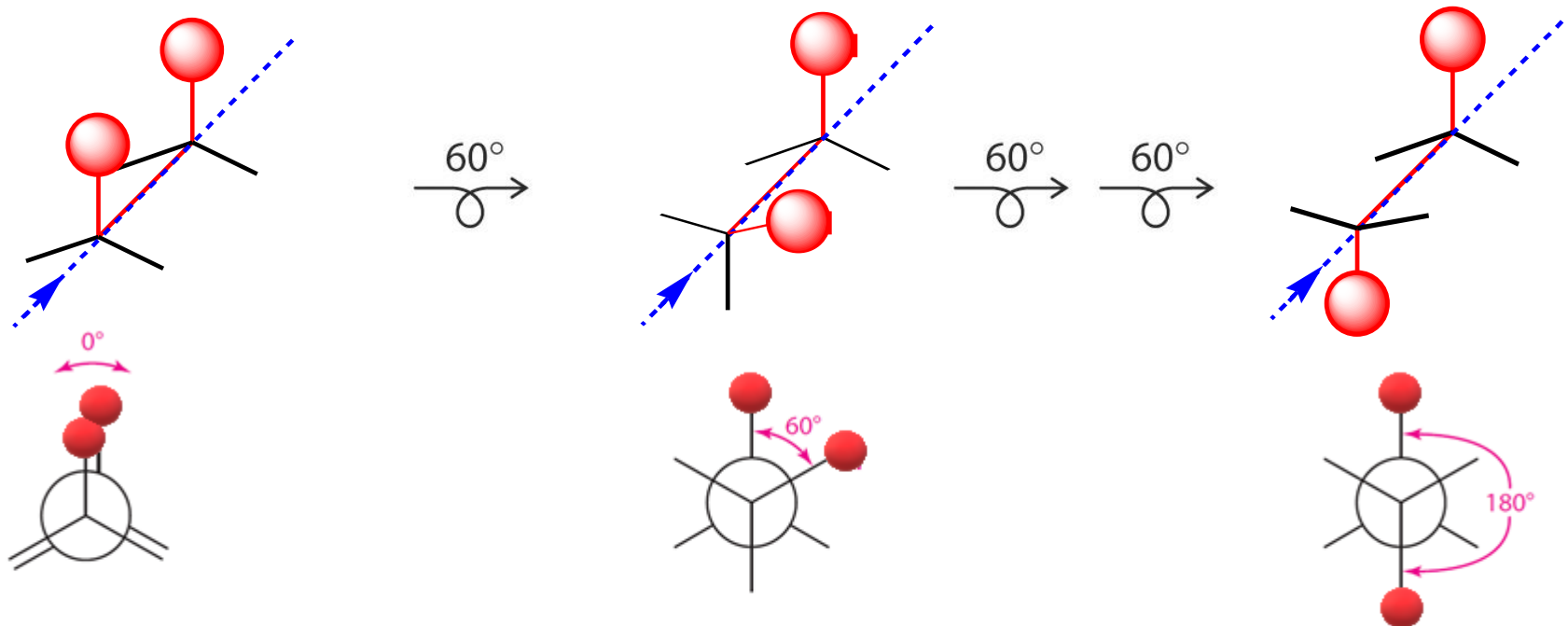
(d)





Τάσεις. Διάγραμμα Δυναμικής Ενέργειας

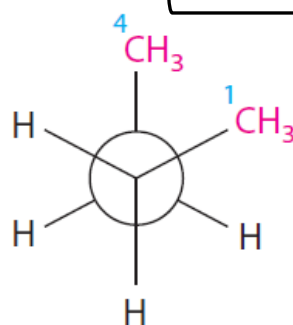
Ανάλυση διαμορφώσεων βουτανίου



Γωνία στρέψης = 0°
Εκλειπτική

Γωνία στρέψης = 60°
Συγκλινής

Γωνία στρέψης = 180°
Αντι



Διαβαθμισμένες

